



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

FACOLTÀ DI SCIENZE E TECNOLOGIE
Corso di Laurea triennale in Fisica

ELABORATO FINALE DI LAUREA

Potenziali nucleari da densità e distribuzioni di spin microscopiche

Candidato:
Andrea Porro
Matricola 848369

Relatore:
Prof. Gianluca Colò
Correlatore:
Dott. Xavier Roca-Maza

Anno Accademico 2016–2017

*We shall not cease from exploration
And the end of all our exploring
Will be to arrive where we started
And know the place for the first time.*

T. S. Eliot, *Little Gidding*

Sommario

Nel presente lavoro si è studiata la possibilità di ottenere, attraverso l'uso della Teoria del Funzionale Densità (DFT), dei potenziali nucleari efficaci per lo stato fondamentale dei nuclei. Nell'ambito della DFT il problema a fermioni interagenti è ricondotto al più semplice problema a particelle indipendenti in un campo medio da esse stesse generato.

Dopo un'introduzione alla fenomenologia nucleare è esposta sinteticamente la DFT, secondo la quale esiste una corrispondenza biunivoca fra energia totale di un sistema fermionico e la sua densità, della quale l'energia è un funzionale. Si dimostra che tale funzionale assume il proprio minimo in corrispondenza della densità dello stato fondamentale del sistema. Una formulazione adatta all'uso pratico deriva dalle equazioni di Kohn-Sham, un set di equazioni alla Schrödinger per particelle indipendenti.

È stato quindi messo a punto un algoritmo di inversione delle equazioni di Kohn-Sham, mai applicato al caso nucleare, a partire da un metodo preesistente. Dal nuovo algoritmo è implementato un codice che riceve in ingresso una densità specifica e fornisce come risultato il potenziale che esattamente la determina. Tale processo è applicato sia a delle densità sperimentali, derivanti da esperimenti di scattering elettronico e adronico, sia a densità teoriche, ottenute da metodi Monte Carlo quantistici. Sono stati considerati nuclei di ^{16}O , ^{40}Ca , ^{48}Ca e ^{208}Pb , per i quali è soddisfatta la condizione di simmetria sferica e sono trascurabili gli effetti di *pairing*. I potenziali ottenuti provano la versatilità del processo e il successo del problema inverso della DFT in ambito nucleare, e, oltre ad essere confrontabili con potenziali noti in letteratura derivanti da altri metodi, come quello di Hartree-Fock con interazioni efficaci, forniscono risultati particolarmente apprezzabili per i nuclei più pesanti, come il ^{208}Pb .

Si è infine proceduto ad uno studio volto all'applicazione del processo di inversione a sistemi *spin-dependent*, sebbene tale tentativo rappresenti una fase ancora più esplorativa delle precedenti: il medesimo algoritmo è stato applicato, a prezzo di modifiche minime, ad un nucleo di ^7Li , per il quale è nota la densità di spin grazie a calcoli di tipo Monte Carlo. Si è studiata quindi la correlazione tra potenziale *spin-dependent* e densità di spin.

INDICE

0.1	Costanti e notazione	9
1	Introduzione	11
2	Introduzione teorica	13
2.1	Il modello a Shell	14
2.2	La Teoria del Funzionale Densità	16
2.2.1	I Teoremi di Hohenberg e Kohn	16
2.2.2	Le equazioni di Kohn-Sham	19
2.3	Hamiltoniana nucleare	22
2.4	Densità di Spin	23
3	Applicazione del modello	27
3.1	Inversione delle equazioni di Kohn-Sham	27
3.1.1	Passaggio in simmetria sferica	31
3.1.2	Termine di spin	31
3.2	Scrittura del codice	36

3.2.1	Risoluzione dell'equazione di Schrödinger	37
3.2.2	Potenziale iniziale	39
3.3	Scelta delle densità empiriche	41
3.3.1	Simulazioni Monte Carlo	42
3.3.2	Scattering elettronico e scattering adronico	42
3.4	Parametrizzazione delle densità	44
3.4.1	Parametrizzazione SOG	45
4	Risultati	49
4.1	Potenziali centrali	50
4.1.1	Densità sperimentali	51
4.1.2	Simulazioni quantum Monte Carlo	58
4.1.3	Confronto fra i due casi	58
4.1.4	Termine Coulombiano	61
4.2	Potenziali di Spin	62
5	Conclusioni	71
A	Energie di particella singola	75

0.1 Costanti e notazione

Nel presente lavoro sono state adottate le seguenti notazioni e le costanti usate, salvo eccezioni esplicite, assumono i seguenti valori:

Massa nucleoni	$mc^2 = 939 \text{ MeV}$ Non si è fatta distinzione tra protoni e neutroni: la differenza fra le masse causa sulle altre osservabili variazioni piccole rispetto a quelle dovute alle incertezze intrinseche ai modelli e ai parametri.
Raggio del protone	$r_{prot} = 0.8768 \text{ fm}$ Si è fatto riferimento all'articolo [1]
Raggio nucleare	$R_n = r_0 A^{1/3} \approx 1.27 A^{1/3} \text{ fm}$
Spessore della superficie nucleare	$a = 0.67 \text{ fm}$
Carica elementare	$q_e \approx 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C} \approx 1.2 \text{ MeV fm}^{1/2}$
Operatore Laplaciano	Δ

In generale le energie sono riportate in MeV e le lunghezze in fm.

CAPITOLO 1

INTRODUZIONE

Il nucleo è un affascinante sistema quantistico a pochi o molti corpi, che spazia in dimensioni dai nuclei più leggeri, formatisi nel Big-Bang, alle stelle di neutroni, con raggio dell'ordine della decina di chilometri. La comprensione della struttura e della dinamica nucleare a partire da un'interazione realistica fra i nucleoni è da sempre un obiettivo della fisica nucleare. Il problema nucleare a molti corpi quantistico contiene svariate caratteristiche comuni ad altri campi, come la fisica della materia condensata, inclusi struttura a *shell*, *pairing* e superfluidità, ma anche altre decisamente meno comuni, come un significativo accoppiamento tra spin e gradi di libertà spaziali, fenomeni di *clustering* di nucleoni e un forte splitting spin-orbita. La sfida è descrivere questi diversi fenomeni fisici all'interno di un quadro unitario e coerente.

Sebbene, quindi, oggi non si conosca una forma analitica esatta dell'interazione nucleare, dal momento che l'interazione tra due nucleoni nel vuoto non è direttamente applicabile nel caso di nucleoni all'interno di un nucleo, molte delle proprietà nucleari fondamentali possono essere ottenute nell'ambito dei modelli di campo medio: in questa trattazione il nucleo è considerato come un insieme di A nucleoni indipendenti, ciascuno dei quali è immerso nel campo generato da tutti gli altri di modo da riprodurre alcune osservabili sperimentali come la densità e le energie di particella singola.

Negli anni sono stati sviluppati numerosi modelli che tentano di individuare la forma migliore del potenziale in approssimazione di campo medio e un ruolo centrale è ricoperto dalla teoria di Hartree-Fock che, attraverso metodi computazionali iterativi, è in grado di determinare un potenziale a partire dall'interazione fra fermioni. Questo metodo, tuttavia, richiede l'inserimento di forme adeguate dell'interazione tra due nucleoni. Esiste una serie di interazioni prodotte di modo da rispettare le simmetrie del sistema e da riprodurre alcune osservabili sperimentali una volta inserite all'interno del processo di Hartree-Fock, come l'interazione di Skyrme o di Gogny, le quali però necessitano di un set di parametri ottenuti da fit sperimentali.

Il metodo proposto in questo lavoro, invece, è completamente diverso. Ricorremo, infatti, alla Teoria del Funzionale Densità (DFT), originariamente studiata e messa a punto nell'ambito di sistemi elettronici e, sebbene non priva di precedenti nella letteratura della fisica nucleare, mai applicata nella sua formulazione inversa a tale ambito. Questo metodo consente di aggirare il problema della mancanza di una forma universalmente applicabile dell'interazione nucleare, poiché afferma la corrispondenza biunivoca del potenziale dalla densità nucleare. Nota quindi la densità per via empirica o per altri mezzi, consente di ottenere un relativo potenziale formalmente esatto senza necessità di ricorrere ad ulteriori parametri.

Nel presente lavoro sono stati ottenuti potenziali per una serie di nuclei quali ^{16}O , ^{40}Ca , ^{48}Ca e ^{208}Pb : in quanto nuclei doppiamente magici godono di particolari simmetrie che agevolano la trattazione formale del problema, come la simmetria sferica e l'assenza di effetti di *pairing*. Si è inoltre provato a declinare la trattazione precedente anche a casi meno simmetrici, in particolare tentando di ricavare una forma del potenziale che dipendesse anche dalla densità di spin del nucleo. In questo caso l'applicazione del modello è stata condotta su un nucleo di ^7Li .

La trattazione sarà così strutturata: nel capitolo 2 viene illustrata la Teoria del Funzionale densità e la sua formulazione mediante equazioni di Kohn-Sham; nel capitolo 3 viene spiegato un metodo per l'inversione delle equazioni ad un fine pratico e alcune caratteristiche del codice usato; nel capitolo 4 sono esposti i risultati del presente lavoro. Seguono alcune conclusioni e spunti di riflessione per sviluppi futuri.

CAPITOLO 2

INTRODUZIONE TEORICA

La descrizione di un sistema nucleare a molti corpi nell'approssimazione di campo medio costituisce, ancora oggi, una via d'accesso privilegiata per la comprensione del nucleo atomico. La dinamica media del singolo nucleone nel campo generato da tutti gli altri nucleoni è il punto di partenza per una gran varietà di metodi a molti corpi: in questo senso, la scelta di una buona base per stati di singola particella è la chiave per la riuscita in un qualsiasi approccio quantistico in tale ambito.

Svariate osservazioni sperimentali, come la presenza dei cosiddetti numeri magici, le energie di legame, i raggi nucleari, l'abbondanza naturale dei nuclei e le proprietà delle reazioni nucleari confermano il notevole successo della semplice rappresentazione di campo medio. In generale, il moto di particelle indipendenti in un campo medio non è una soluzione esatta del problema a molti corpi: restano infatti escluse da tale pittura interazioni residue o dinamiche collettive. L'approccio della Teoria del Funzionale Densità consente di individuare con metodo variazionale il miglior campo medio possibile che minimizzi l'interazione residua. Nondimeno, ad oggi è ancora una sfida trovare questo campo in modo che rispetti le simmetrie del sistema.

2.1 Il modello a Shell

Un punto di collegamento tra i modelli di campo medio e la fisica nucleare è costituito dal modello a Shell, il quale riproduce a livello nucleare la ben nota struttura a gusci chiusi caratteristica dell'ambito atomico. Scelta una forma per il potenziale nucleare è sufficiente risolvere l'equazione di Schrödinger per ottenere autofunzioni e autoenergie di singola particella per il potenziale in questione: le prime consentono di calcolare la densità nucleare, un'importante osservabile per verificare la veridicità del modello in esame; le seconde permettono un raffronto diretto con alcune energie di separazione tra orbitali nucleari ottenute tramite spettroscopia nucleare¹.

Nel presente lavoro andremo a studiare, prevalentemente, nuclei molto simmetrici, di modo da semplificare la trattazione. In particolare richiediamo che sia applicabile la richiesta di simmetria sferica e che le shell di valenza del nucleo siano chiuse, così da poter trascurare effetti di pairing tra nucleoni: quest'ultima richiesta si traduce nella scelta di soli nuclei doppiamente magici.

Storicamente la prima forma di potenziale adottato per la costruzione di un modello a shell è il potenziale armonico: esso permette di accedere ad alcuni vantaggi non trascurabili, primo fra tutti la conoscenza della forma analitica delle soluzioni alle equazioni di Schrödinger ad esso associate. Se opportunamente parametrizzato con $\hbar\omega = 41A^{-1/3}$ MeV consente, inoltre, di replicare, in prima approssimazione, parte della struttura a shell e in particolare i primi numeri magici. I risultati migliorano se viene inoltre incluso un termine di interazione Spin-Orbita. L'inconveniente principale, tuttavia, è ben visibile alla semplice osservazione della forma del potenziale stesso: esso non è limitato, e diverge per distanze superiori al raggio nucleare, un andamento decisamente non fisico.

Un'ulteriore forma del potenziale di cui siano note le soluzioni è la buca di potenziale: con essa viene meno l'inconveniente appena esposto per il potenziale armonico.

Una scrittura che in qualche modo include i vantaggi di entrambe le forme

¹Per il teorema di Koopmans, infatti, l'energia di separazione di un nucleone dal nucleo corrisponde all'energia dell'ultimo orbitale nucleare cambiata di segno, mentre l'energia del primo stato eccitato corrisponde all'energia dell'orbitale immediatamente successivo a quello di valenza.

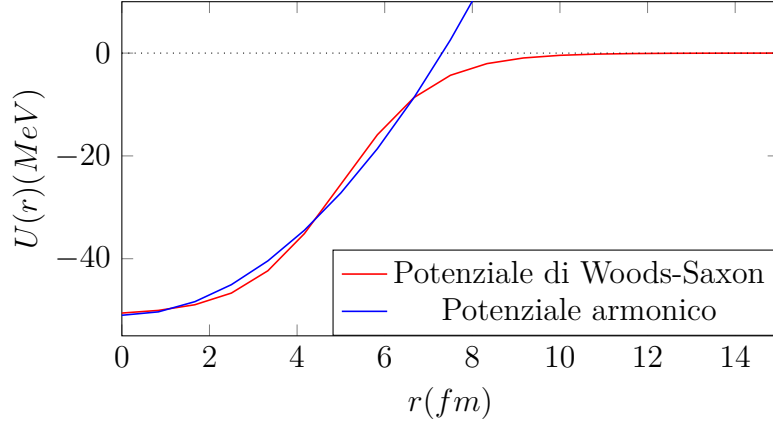


Figura 2.1 – Potenziali nucleari di campo medio a confronto

sopra citate e che permette di replicare al meglio gli autovalori dell'energia è il potenziale di Woods-Saxon:

$$v_{WS}(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R_N}{a}}} \quad (2.1)$$

dove V_0 indica la profondità della buca, R_N il raggio nucleare e a lo spessore della superficie nucleare [2]. Questa forma riproduce la componente attrattiva del potenziale centrale, il quale rende conto anche del termine di simmetria, con

$$V_0 = 51 \pm 33 \frac{N - Z}{N + Z} \text{ MeV} \quad (2.2)$$

Il segno positivo, infatti, vale per i protoni, mentre quello negativo per i neutroni, e riproduce la maggior intensità del legame p-n rispetto ai legami p-p e n-n. Il potenziale di Woods-Saxon verrà scelto, come sarà meglio specificato in seguito, quale punto di partenza per i processi iterativi interni al codice.

Un'aggiunta al potenziale di Woods-Saxon, necessaria per migliorare la corrispondenza tra dato sperimentale e modello, è l'interazione Spin-Orbita (oltre che, naturalmente, un termine coulombiano per i protoni). Essa è inseribile, se ci si riferisce ad un potenziale di tipo Woods-Saxon, nella forma:

$$v_{SO}(r) = \frac{k_0 r_0^2}{r} \left[\frac{d}{dr} \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R_N}{a}}} \right] \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (2.3)$$

coerentemente con l'usuale descrizione della componente radiale come $v_{LS}(r) = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} v(r)$ [3], con $k_0 = 0.44V_0$ opportuna costante di proporzionalità. Come verrà

mostrato in seguito (figura 3.1) il termine di interazione Spin-Orbita non influisce significativamente sulla forma delle funzioni d'onda, quanto, piuttosto, sugli autovalori dell'energia, che risentono di splitting dell'ordine del MeV: questo dato rappresenta una peculiarità del sistema nucleare, dal momento che in ambito atomico, ad esempio, il termine di accoppiamento Spin-Orbita non costituisce che una piccola correzione. Per ulteriori chiarimenti si rimanda nuovamente a [2]. Per i valori dei parametri utilizzati si rimanda alla sezione 0.1.

2.2 La Teoria del Funzionale Densità

2.2.1 I Teoremi di Hohenberg e Kohn

La Teoria del Funzionale Densità (DFT) è legata ai nomi dei due fisici Pierre Hohenberg e Walter Kohn, i quali pubblicarono nella prima metà degli anni '60 del Novecento una serie di articoli [4] che portarono alla formulazione dei due teoremi che recano i loro nomi. Da questi teoremi prende le mosse il successivo sviluppo della DFT. Essi svilupparono tale formalismo nel solco di una ricerca diretta allo studio di gas elettronici non omogenei; tuttavia esso è, fatte opportune considerazioni, facilmente estendibile a sistemi fermionici in generale, e, nel nostro specifico, al sistema nucleo.

Hohenberg e Kohn studiarono un principio variazionale formalmente esatto per l'energia dello stato fondamentale, in cui la densità di probabilità $n(\mathbf{r})$ è la funzione variabile. In questa formulazione compare un funzionale universale $F[n(\mathbf{r})]$ che si applica ai sistemi fermionici nel loro stato fondamentale, indipendentemente dal potenziale esterno di cui risentono. Una volta nota la forma di tale funzionale è, in linea di principio, immediato determinare l'energia dello stato fondamentale per un dato potenziale esterno. Analizziamo ora più in dettaglio i due teoremi.

Primo Teorema: la Densità come variabile fondamentale

Preso un insieme arbitrario di fermioni rinchiusi in un recipiente molto esteso (di modo da poter trascurare gli effetti di superficie) e in moto sotto l'effetto di un po-

tenziale esterno $v(\mathbf{r})$ e di una mutua interazione possiamo scrivere un'Hamiltoniana della forma:

$$H = T + V + U \quad (2.4)$$

dove T rappresenta l'energia cinetica complessiva, V l'energia potenziale associata al campo esterno agente e U l'energia potenziale associata alla mutua interazione fra fermioni. In unità atomiche, considerando che il sistema si trovi in uno stato Ψ avente funzione d'onda relativa $\psi(\mathbf{r})$, esse sono così definite:

$$T := \frac{1}{2} \int \nabla \psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.5a)$$

$$V := \int v(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.5b)$$

$$U := \frac{1}{2} \int \psi^*(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (2.5c)$$

Per semplicità, d'ora in avanti, assumeremo che lo stato fondamentale sia non degenere. Ci riferiamo alla densità nello stato fondamentale Ψ come:

$$n(\mathbf{r}) := \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle \langle \Psi | \mathbf{r} \rangle = |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.6)$$

la quale è evidentemente un funzionale di $v(\mathbf{r})$.

Mostriamo ora che, a meno di una costante additiva arbitraria, il potenziale $v(\mathbf{r})$ è un funzionale unico di $n(\mathbf{r})$. La dimostrazione procede per assurdo: assumiamo che esista un ulteriore potenziale $v'(\mathbf{r})$, avente stato fondamentale Ψ' , che dia luogo alla *medesima* densità $n(\mathbf{r})$. Ora, a meno che $v(\mathbf{r}) - v(\mathbf{r}') = \text{const}$, Ψ e Ψ' non possono essere uguali, dal momento che soddisfano due distinte equazioni di Schrödinger. Denotando l'Hamiltoniana e le energie allo stato fondamentale associate a Ψ e Ψ' con H , H' e E , E' , per la proprietà di minimo dello stato fondamentale abbiamo:

$$E' = \langle \Psi' | H' | \Psi' \rangle < \langle \Psi | H' | \Psi \rangle = \langle \Psi | H - V + V' | \Psi \rangle \quad (2.7)$$

di modo che

$$E' < E + \int [v'(\mathbf{r}) - v(\mathbf{r})] n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.8)$$

Scambiando quantità con e senza indice arriviamo, nella stessa maniera, ad affermare che:

$$E < E' + \int [v(\mathbf{r}) - v'(\mathbf{r})]n(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2.9)$$

Sommando le due equazioni 2.7 e 2.8 arriviamo all'assurdo

$$E + E' < E + E' \quad (2.10)$$

Pertanto $v(\mathbf{r})$ è un funzionale unico di $n(\mathbf{r})$ a meno di una costante additiva. Poiché a sua volta $v(\mathbf{r})$ determina H , è chiaro che lo stato fondamentale dell'intero sistema a molti corpi è un funzionale unico di $n(\mathbf{r})$. Riassumiamo pertanto nel seguente

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.*

Secondo Teorema: il Principio Variazionale

Dal momento che lo stato complessivo del sistema Ψ è un funzionale di $n(\mathbf{r})$, così pure devono evidentemente esserlo l'energia cinetica e l'energia di interazione. Definiamo pertanto:

$$F[n(\mathbf{r})] := \langle \Psi | T + U | \Psi \rangle \quad (2.11)$$

dove $F[n(\mathbf{r})]$ è una funzione universale, valida per qualunque numero di particelle e qualsiasi potenziale esterno. Definiamo in questo contesto, per un dato potenziale esterno $v(\mathbf{r})$, il funzionale dell'energia:

$$\mathcal{E}_v[n] := \int v(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} + F[n] \quad (2.12)$$

Ovviamente, per la densità corretta $n(\mathbf{r})$, $\mathcal{E}_v[n]$ equivale all'energia dello stato fondamentale E .

Mostriamo ora che $\mathcal{E}_v[n]$ assume il proprio minimo per la corretta densità $n(\mathbf{r})$. Specifichiamo che andremo a considerare le sole funzioni $n(\mathbf{r})$ che soddisfino la condizione di normalizzazione sul numero N di particelle

$$N[n] := \int n(\mathbf{r})d\mathbf{r} = N \quad (2.13)$$

È noto che il funzionale dell'energia in Ψ'

$$\mathcal{E}_v[\Psi'] := \langle \Psi' | V | \Psi' \rangle + \langle \Psi' | T + U | \Psi' \rangle \quad (2.14)$$

assume il suo minimo nel corretto stato fondamentale Ψ , relativo a variazioni arbitrarie di Ψ' in cui il numero di particelle è mantenuto costante. In particolare, sia Ψ' lo stato fondamentale associato ad un altro potenziale esterno $v'(\mathbf{r})$. Allora, per le equazioni 2.11 e 2.14

$$\mathcal{E}_v[\Psi'] = \int v(\mathbf{r})n'(\mathbf{r})d\mathbf{r} + F[n'] > \mathcal{E}_v[\Psi] = \int v(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} + F[n] \quad (2.15)$$

È così dimostrato il principio variazionale di Hohenberg e Kohn:

$$E_v[n'] > E_v[n] \quad (2.16)$$

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.*

2.2.2 Le equazioni di Kohn-Sham

Una riformulazione più pratica e di uso più accessibile della DFT arriva da un articolo [5] di Walter Kohn e Lu Jeu Sham di poco successivo al sopracitato di Hohenberg e Kohn. Il concetto fondamentale su cui poggia la loro trattazione consiste nell'idea che un sistema di particelle interagenti in un potenziale esterno possa essere descritto in maniera efficace da un analogo sistema di particelle non interagenti con potenziale esterno opportunamente modificato di modo che la densità $n(\mathbf{r})$ risulti la stessa. Sarà pertanto agevole assegnare a ciascun fermione un'autofunzione di particella singola $\psi_i(\mathbf{r})$, detta *orbitale di Kohn-Sham*, e scrivere una funzione d'onda complessiva nella forma di un determinante di Slater; la densità di probabilità associata è ora scritta nella forma:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.17)$$

Ricordando la definizione 2.11 del funzionale $F[n(\mathbf{r})]$ procediamo a riscriverla nella forma:

$$F[n] := T_{ni}[n] + E_{xc}[n] \quad (2.18)$$

dove $T_{ni}[n]$ rappresenta l'energia cinetica di un sistema di particelle non interagenti di densità $n(\mathbf{r})$ e $E_{xc}[n]$ è, per definizione, l'energia di scambio e correlazione di un sistema interagente di densità $n(\mathbf{r})$. L'energia complessiva, pertanto, assume la forma:

$$E[n] = T_{ni}[n] + E_{xc}[n] + \int v(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2.19)$$

dove possiamo riscrivere il termine $T_{ni}[n]$ nella forma:

$$T_{ni}[n] = \sum_i -\frac{1}{2} \int \psi_i^*(\mathbf{r})\Delta\psi_i(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2.20)$$

Per individuare il minimo del funzionale energia imponiamo che la sua variazione sia nulla:

$$\delta E = 0 \quad (2.21)$$

In particolare per la condizione di normalizzazione (corrispondente alla conservazione del numero di particelle)

$$\int \delta n(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 0 \quad (2.22)$$

e per la richiesta di ortonormalità delle funzioni d'onda (necessaria in approssimazione di fermioni indipendenti) aggiungiamo un moltiplicatore di Lagrange nella 2.21:

$$\delta \left(E - \sum_i \varepsilon_i \int \psi_i^*(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r})d\mathbf{r} \right) = 0 \quad (2.23)$$

La variazione può essere eseguita a piacere rispetto a ψ_i o a ψ_i^* : per comodità scegliamo la seconda alternativa. Scrivendo per esteso la 2.23:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta \psi_i^*} \left(\sum_i -\frac{1}{2} \int \psi_i^*(\mathbf{r})\Delta\psi_i(\mathbf{r})d\mathbf{r} + E_{xc}[n(\mathbf{r})] + \right. \\ \left. + \int v(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \sum_i \varepsilon_i \int \psi_i^*(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r})d\mathbf{r} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.24)$$

e ricorrendo alle scritture

$$\frac{\delta n}{\delta \psi_i^*} = \psi_i \quad (2.25a)$$

$$\frac{\delta}{\delta \psi_i^*} = \frac{\delta n}{\delta \psi_i^*} \frac{\delta}{\delta n} = \psi_i \frac{\delta}{\delta n} \quad (2.25b)$$

otteniamo le equazioni di Kohn-Sham:

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + \frac{\delta E_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.26)$$

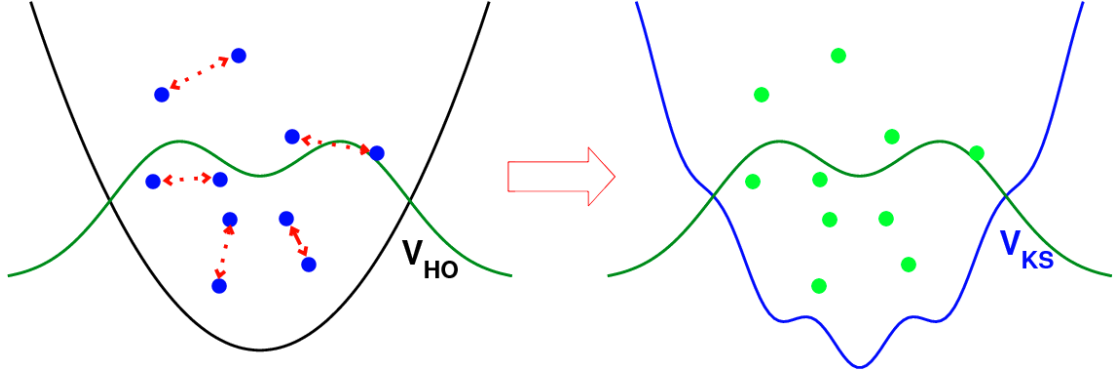


Figura 2.2 – Esempio di potenziale di KS per particelle interagenti in un potenziale di tipo armonico: la forma del potenziale efficace è modificata opportunamente per simulare l'interazione fra le particelle, di modo che sia conservata la densità iniziale (in verde).

Riscrivendo

$$\frac{\delta E_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}) = v_{KS}(\mathbf{r}) \quad (2.27)$$

la 2.26 assume la forma (alla Schrödinger):

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + v_{KS}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.28)$$

in cui $v_{KS}(\mathbf{r})$ è, sostanzialmente, un potenziale efficace che descrive il campo medio del sistema fermionico in esame. In questa equazione tutte le grandezze dotate di indice sono autovalori ed autofunzioni associate al problema di particelle indipendenti in un campo medio. Pertanto gli orbitali di Kohn-Sham non corrispondono alle autofunzioni del problema iniziale, ma agli orbitali che le particelle avrebbero se si muovessero indipendentemente le une dalle altre sotto l'influsso di un comune campo medio esterno, presente nella forma $v_{KS}(\mathbf{r})$, funzionale unico della densità $n(\mathbf{r})$ per il primo teorema di Hohenberg e Kohn. In questa maniera il problema a particelle interagenti in un potenziale esterno è stato ricondotto ad un più semplice problema a particelle indipendenti in un potenziale efficace tale che non sia modificata la densità $n(\mathbf{r})$ (figura 2.2).

Pertanto, una volta che si sia a conoscenza di una densità $n(\mathbf{r})$ affidabile, è possibile risalire al potenziale efficace ad essa associata.

2.3 Hamiltoniana nucleare

Il lavoro di Hohenberg, Kohn e Sham venne originariamente formulato immaginando un'applicazione a sistemi elettronici. Tuttavia, come si è visto, è applicabile a sistemi generici di fermioni. Nel tentativo di estendere la trattazione al caso nucleare occorre fare alcune precisazioni: il sistema nucleo è composto da due differenti tipi di nucleoni, ognuno dei quali ha una propria hamiltoniana di particella singola, ed essi non risentono di alcun campo esterno, ma solo della loro mutua interazione. Per cui, diversamente dagli elettroni, il termine V_{ext} risulta nullo.

Nella più generica trattazione nucleare di campo medio, attraverso un'approssimazione dell'energia del sistema a molti corpi mediante un funzionale della matrice densità ad un corpo, si osserva che l'energia è principalmente influenzata dalle densità locali. Questa osservazione definisce la *Local Density Approximation* (LDA). Una descrizione complessiva e sintetica dell'argomento si può trovare in [6]. In tale esposizione viene considerato il set di densità più generico possibile, comprensivo delle rispettive derivate fino al secondo ordine, per costruire la densità locale di energia. In questo formalismo il funzionale energia è quindi espresso come un integrale tridimensionale della densità di energia $\mathcal{H}(\mathbf{r})$:

$$\mathcal{E} = \int \mathcal{H}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.29)$$

dove $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ può essere rappresentato come somma dell'energia cinetica e dei termini isoscalare e isovettoriale. Facendo uso della notazione di isospin, che indica con 0 e 1 gli stati di singoletto e tripletto rispettivamente, e ripristinando i fattori dimensionali:

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \tau_0 + \mathcal{H}_0(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_1(\mathbf{r}) \quad (2.30)$$

dove, detto t il generico indice per stati di tripletto o singoletto,

$$\mathcal{H}_t(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_t^{even}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_t^{odd}(\mathbf{r}) \quad (2.31)$$

con

$$\mathcal{H}_t^{even} = \mathcal{H}_t^{even}[n_t, \tau_t, \mathbf{J}_t] \quad (2.32a)$$

$$\mathcal{H}_t^{odd} = \mathcal{H}_t^{odd}[\mathbf{s}_t, \mathbf{T}_t, \mathbf{j}_t] \quad (2.32b)$$

definite τ densità di energia cinetica, $\mathbf{s}$ densità di spin, $\mathbf{j}$ densità di momento, $\mathbf{J}$ tensore di corrente di spin e $\mathbf{T}$ componente vettoriale della densità di energia cinetica. Si osservi che gli indici *even* e *odd* non vanno intesi come riferiti alla parità rispetto ad inversione temporale dei funzionali $\mathcal{H}_t^{even}$ e $\mathcal{H}_t^{odd}$, i quali sono evidentemente pari rispetto ad inversione temporale, ma solo per indicare la dipendenza da due classi di densità. Le densità di energia dipendono dalle grandezze in esame tramite delle costanti di accoppiamento, come indicato nella [7]. Ricordando che la densità in questo formalismo si ricollega alle definizioni classiche (distinzione protoni neutroni) mediante:

$$\rho_0 = \rho_n + \rho_p \quad \rho_1 = \rho_n - \rho_p \quad (2.33)$$

(con ρ generica densità) e calcolando la variazione dei funzionali 2.32 rispetto alle sei densità si arriva al campo medio. Le relative hamiltoniane di singola particella per protone e neutrone sono:

$$h_n = -\frac{\Delta}{2} + \Gamma_0^{even} + \Gamma_0^{odd} + \Gamma_1^{even} + \Gamma_1^{odd} \quad (2.34a)$$

$$h_p = -\frac{\Delta}{2} + \Gamma_0^{even} + \Gamma_0^{odd} - \Gamma_1^{even} - \Gamma_1^{odd} \quad (2.34b)$$

dove la dipendenza dalle densità sopra citate è contenuta nei termini Γ . Si rimanda per dettagli alle referenze [8, 7].

2.4 Densità di Spin

Fino ad ora abbiamo ipotizzato che il primo teorema di Hohenberg e Kohn, il quale asserisce la dipendenza univoca di un potenziale efficace in approssimazione di campo medio dalla densità, si riferisse soltanto alla densità intesa come numero di particelle per unità di volume. In realtà la trattazione può essere estesa ad un livello più generale, fino ad includere anche altre densità, prima fra tutte la densità di spin. Pertanto, come mostrato nel paragrafo precedente, possiamo considerare che il potenziale nella sua forma più generica sia costituito da diversi termini i quali dipendono ciascuno univocamente da un tipo di densità distinta. Concentrandoci sul solo termine di spin, che costituisce la parte più importante di $\mathcal{H}_t^{odd}(\mathbf{r})$, sempre da [8] possiamo definire

$$\Gamma_t^{odd} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Sigma}_t(\mathbf{r}) \quad (2.35)$$

$$\Sigma_t = 2C_t^s \mathbf{s}_t \quad (2.36)$$

Se consideriamo di avere già incluso nella trattazione precedente i termini con parità temporale positiva, almeno in prima approssimazione, in quanto già ci siamo soffermati su potenziali dipendenti univocamente da $n(\mathbf{r})$, possiamo scrivere:

$$h_n = h_{n\text{ now}} + \Gamma_0^{\text{odd}} + \Gamma_1^{\text{odd}} = h_{n\text{ now}} + 2(c_0^s \mathbf{s}_0 + c_1^s \mathbf{s}_1) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.37a)$$

$$h_p = h_{p\text{ now}} + \Gamma_0^{\text{odd}} - \Gamma_1^{\text{odd}} = h_{p\text{ now}} + 2(c_0^s \mathbf{s}_0 - c_1^s \mathbf{s}_1) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.37b)$$

con $h_{n\text{ now}}$ l'hamiltoniana contenente i termini a parità positiva già considerati. Passando alle densità relative a protoni e neutroni

$$h_n = h_{n\text{ now}} + 2[(c_0^s + c_1^s) \mathbf{s}_n + (c_0^s - c_1^s) \mathbf{s}_p] \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.38a)$$

$$h_p = h_{p\text{ now}} + 2[(c_0^s - c_1^s) \mathbf{s}_n + (c_0^s + c_1^s) \mathbf{s}_p] \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.38b)$$

Ad un livello più generale rispetto a quanto fatto fino ad ora possiamo quindi scrivere:

$$v_{KS}([\rho], \mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = v([n(\mathbf{r})], \mathbf{r}) + \Sigma([\mathbf{s}(\mathbf{r})], \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.39)$$

In questo modo il primo termine corrisponde alla componente del potenziale dipendente univocamente dalla densità di probabilità mentre il secondo dalla densità di spin $\mathbf{s}(\mathbf{r})$. L'articolo [8] arriva ad affermare che esso è esprimibile nella forma

$$\Sigma(\mathbf{r}) = c \mathbf{s}(\mathbf{r}) \quad (2.40)$$

di modo che nella 3.44 sia anche rispettata l'invarianza rispetto ad inversione temporale. Ricordiamo inoltre la definizione di densità di spin:

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \sum_{i\sigma\sigma'} \psi_i^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) \hat{\boldsymbol{\sigma}} \psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}') \quad (2.41)$$

Nel tentativo di non allontanarci eccessivamente dall'ambito nucleare, per non cadere in complicazioni superflue, osserviamo che, nel caso di nuclei con tutte le shell complete, questo secondo termine deve essere nullo, dal momento che fermioni identici con tutti i numeri quantici uguali sono costretti ad avere spin antiparallelo e la densità di spin deve quindi essere nulla. Per nuclei che, complessivamente, non hanno invece spin nullo, orientiamo l'asse z in modo che esso risulti parallelo alla densità di spin, la quale è, ovviamente una grandezza vettoriale. È come se venisse

introdotta una polarizzazione, analogamente ad un sistema in cui sia applicato un campo magnetico esterno $\mathbf{B}$ che interagisce solo con lo spin (e non con il momento angolare orbitale), selezionando una direzione privilegiata all'interno del problema. In questo modo abbiamo che

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = s_z(\mathbf{r})\hat{e}_z \quad (2.42)$$

e possiamo scrivere pertanto

$$v_{KS}([\rho], \mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = v([n(\mathbf{r})], \mathbf{r}) + \Sigma_z(\mathbf{r})\sigma_z \quad (2.43)$$

Le equazioni di Kohn-Sham abbinate a questo potenziale sono:

$$-\frac{\Delta}{2}\psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) + v(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) + \Sigma_z(\mathbf{r})\sigma_z\psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = \varepsilon_{i\sigma}\psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) \quad (2.44)$$

3.1 Inversione delle equazioni di Kohn-Sham

Riassumendo quanto esposto finora, le equazioni di Kohn-Sham assumono la forma:

$$\varepsilon_j \underline{\phi_j(\mathbf{r})} = \left[-\frac{\Delta}{2} + v_{KS}([n], \mathbf{r})\right] \underline{\phi_j(\mathbf{r})} \quad (3.1)$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N |\underline{\phi_j(\mathbf{r})}|^2 \quad (3.2)$$

$$v_{KS}([n], \mathbf{r}) = v_{ext}(\mathbf{r}) + v_H([n], \mathbf{r}) + \underline{v_{xc}([n], \mathbf{r})} \quad (3.3)$$

dove le quantità sottolineate indicano le incognite del problema inverso. Seguendo un'alternativa riportata nell'articolo [9], ricorriamo al metodo iterativo di inversione di Van Leeuwen e Baerends [10]. Esso è ottenuto moltiplicando a sinistra entrambi i lati dell'equazione 3.1 per ϕ_j^* e sommando quindi sull'indice j , per arrivare a:

$$\sum_{j=1}^N \varepsilon_j |\phi_j(\mathbf{r})|^2 = \sum_{j=1}^N \left\{ -\phi_j^*(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} \phi_j(\mathbf{r}) + v_{KS}([n], \mathbf{r}) |\phi_j(\mathbf{r})|^2 \right\} \quad (3.4)$$

Dividendo ora per $n(\mathbf{r})$ e isolando il potenziale si ottiene:

$$v(\mathbf{r}) = \frac{1}{n(\mathbf{r})} \sum_{j=1}^N \left\{ \phi_j^*(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} \phi_j(\mathbf{r}) + \varepsilon_j |\phi_j(\mathbf{r})|^2 \right\} \quad (3.5)$$

Questa formula è quindi inserita in uno schema iterativo sostituendo la densità di probabilità al denominatore con una densità specifica, la quale può corrispondere ad una densità sperimentale o proveniente da calcoli di altro genere, come, nel nostro caso, simulazioni Monte Carlo. Il processo si ripete fino alla convergenza tramite la formula

$$v^{k+1}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\tilde{n}(\mathbf{r})} \sum_{j=1}^N \left\{ \phi_j^{k*}(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} \phi_j^k(\mathbf{r}) + \varepsilon_j^k |\phi_j^k(\mathbf{r})|^2 \right\} = \frac{n^k(\mathbf{r})}{\tilde{n}(\mathbf{r})} v^k(\mathbf{r}) \quad (3.6)$$

avendo introdotto l'indice di iterazione k e la notazione $\tilde{n}(\mathbf{r})$ per la densità sperimentale. Questo semplice schema iterativo ha un significato fisico particolarmente trasparente: aumenta $v^{k+1}(\mathbf{r})$ nelle regioni in cui $n^k(\mathbf{r}) > \tilde{n}(\mathbf{r})$ e lo riduce nelle regioni in cui $n^k(\mathbf{r}) < \tilde{n}(\mathbf{r})$.

Il processo si può arrestare una volta raggiunta la condizione

$$\max_{\mathbf{r}} |n^k(\mathbf{r}) - \tilde{n}(\mathbf{r})| < \epsilon \quad (3.7)$$

dove ϵ , usualmente, è stato scelto di modo da rappresentare circa l'1% del valore tipico della densità $\tilde{n}(\mathbf{r})$.

Ora, questo metodo, così come le equazioni di Kohn-Sham in genere, trovano la loro naturale applicazione in sistemi elettronici, per cui, al fine di ridurre, per esempio, la densità teorica di elettroni in regioni in cui la densità sperimentale è inferiore, è necessario incrementare il potenziale. Questa modalità è, evidentemente, efficace solo a patto che il potenziale sia positivo (la quale richiesta è facilmente realizzata ricordando che ogni potenziale, indipendentemente dalla propria natura fisica, è matematicamente definito a meno di una costante additiva).

Questo ragionamento non vale però per il caso nucleare, dal momento che, almeno in approssimazione di campo medio, esso è puramente attrattivo, e in prima approssimazione è assimilabile ad una buca di potenziale (tipicamente scritta in modo da andare a zero all'infinito, quindi negativa). L'applicazione di questa tecnica, pertanto, porterebbe all'illogico risultato di incrementare la profondità della buca laddove la densità teorica superi quella sperimentale; viceversa per le regioni a densità teorica minore. Pertanto le autofunzioni derivanti dal nuovo potenziale

sarebbero ancora più localizzate nelle zone in cui valeva $n^k(\mathbf{r}) > \tilde{n}(\mathbf{r})$ e meno addensate per quelle con $n^k(\mathbf{r}) < \tilde{n}(\mathbf{r})$. La densità teorica che ne seguirebbe, dunque, sarebbe ancora più lontana di quella precedente dall'obiettivo di convergenza.

Ad ogni modo la struttura generale del metodo è tutt'altro che deprecabile, vista la sua semplicità e chiarezza fisica: cerchiamo pertanto di analizzarla attentamente e modificarla in nostro favore.

Adattamento al caso nucleare

Definiamo innanzitutto

$$\delta = \frac{n^k(\mathbf{r})}{\tilde{n}(\mathbf{r})} - 1. \quad (3.8)$$

In questo modo possiamo riscrivere la 3.6 come

$$v^{k+1}(\mathbf{r}) = \frac{n^k(\mathbf{r})}{\tilde{n}(\mathbf{r})} v^k(\mathbf{r}) = (1 + \delta) v^k(\mathbf{r}). \quad (3.9)$$

Il metodo in esame produrrà un effetto differente a seconda delle regioni in cui è applicato. Analizziamoli caso a caso:

- $n^k(\mathbf{r}) > \tilde{n}(\mathbf{r}) \Rightarrow \delta > 0$, per cui $v^{k+1}(\mathbf{r}) > v^k(\mathbf{r})$
- $n^k(\mathbf{r}) = \tilde{n}(\mathbf{r}) \Rightarrow \delta = 0$, per cui $v^{k+1}(\mathbf{r}) = v^k(\mathbf{r})$
- $n^k(\mathbf{r}) < \tilde{n}(\mathbf{r}) \Rightarrow \delta < 0$, per cui $v^{k+1}(\mathbf{r}) < v^k(\mathbf{r})$.

Nel caso nucleare vorremmo che accadesse l'esatto contrario, ovvero:

- $n^k(\mathbf{r}) > \tilde{n}(\mathbf{r}) \Rightarrow v^{k+1}(\mathbf{r}) < v^k(\mathbf{r})$
- $n^k(\mathbf{r}) = \tilde{n}(\mathbf{r}) \Rightarrow v^{k+1}(\mathbf{r}) = v^k(\mathbf{r})$
- $n^k(\mathbf{r}) < \tilde{n}(\mathbf{r}) \Rightarrow v^{k+1}(\mathbf{r}) > v^k(\mathbf{r})$.

In termini di δ questo risultato sarebbe facilmente ottenuto se l'equazione 3.9 avesse la forma:

$$v^{k+1}(\mathbf{r}) = (1 - \delta) v^k(\mathbf{r}) \quad (3.10)$$

In termini delle densità la richiesta è ottenibile dalla semplice sostituzione di δ con la sua definizione:

$$1 - \delta = 2 - \frac{n^k(\mathbf{r})}{\tilde{n}(\mathbf{r})} \quad (3.11)$$

grazie alla quale l'algoritmo assume la nuova forma:

$$v^{k+1}(\mathbf{r}) = (1 - \delta)v^k(\mathbf{r}) = \left(2 - \frac{n^k(\mathbf{r})}{\tilde{n}(\mathbf{r})}\right)v^k(\mathbf{r}) \quad (3.12)$$

Ora l'algoritmo ad ogni passo incrementa la profondità del potenziale di un fattore δ nelle regioni in cui $n^k(\mathbf{r}) < \tilde{n}(\mathbf{r})$, di modo da "attirare" le autofunzioni verso tali zone, mentre diminuisce la profondità sempre di un fattore δ nelle regioni in cui $n^k(\mathbf{r}) > \tilde{n}(\mathbf{r})$, di modo da "allontanare" le autofunzioni da esse.

Per quanto riguarda parti eventualmente a segno positivo del potenziale nucleare, determinate dall'interazione Coulombiana tra i soli protoni, il funzionamento dell'algoritmo è, ovviamente, quello originale, poiché messo a punto proprio per potenziali positivi, come mostrato in precedenza (equazione 3.6). Complessivamente possiamo quindi riassumere:

$$v^{k+1}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \left(2 - \frac{n^k(\mathbf{r})}{\tilde{n}(\mathbf{r})}\right)v^k(\mathbf{r}) & v^k(\mathbf{r}) < 0 \\ \frac{n^k(\mathbf{r})}{\tilde{n}(\mathbf{r})}v^k(\mathbf{r}) & v^k(\mathbf{r}) \geq 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

Questo schema, così come quello da cui deriva, è sensibile al potenziale di prova iniziale $v^0(\mathbf{r})$: si è ritenuto opportuno introdurre l'uso di un prefattore che impedisse l'insorgere di oscillazioni incontrollate del potenziale tra un'iterazione e l'altra, che avrebbero ostacolato il processo di convergenza. L'articolo di van Leeuwen e Baerends è utile anche in questa circostanza, sebbene inerente l'ambito elettronico, e suggerisce di scegliere il prefattore imponendo la condizione (opportunamente modificata per il nostro caso):

$$1 - \gamma < \alpha \left(2 - \frac{n^k(\mathbf{r})}{\tilde{n}(\mathbf{r})}\right) < 1 + \gamma \quad (3.14)$$

con α prefattore e $\gamma \approx 0.05$. In questo modo ad ogni iterazione il potenziale vira verso una forma via via più consona, senza però mai essere modificato eccessivamente da un passaggio al seguente. Per ulteriori chiarimenti si rimanda a [10].

3.1.1 Passaggio in simmetria sferica

L'equazione 3.13 corrisponde al punto centrale del codice che verrà implementato: per semplicità, come già anticipato, ci si limiterà a sistemi a simmetria sferica, per cui si avranno a disposizione densità di riferimento $\tilde{n}(r)$ e studieremo potenziali a simmetria sferica $v(r)$. Resta da determinare una forma $n(r)$ per le densità di probabilità teoriche. Essa è scrivibile come

$$n(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) u_{\alpha}^2(r) \quad (3.15)$$

dove α raccoglie i numeri quantici n_{α} , l_{α} e j_{α} e $(2j_{\alpha} + 1)$ indica il numero di particelle in un dato stato e implica che gli orbitali in questione appartengono a shell complete.

3.1.2 Termine di spin

Illustriamo ora quale metodo sia opportuno seguire per invertire le equazioni di Kohn-Sham quando venga incluso anche un termine relativo alla densità di spin. Seguendo la trattazione della sezione 2.4, in particolare l'equazione 2.44 le equazioni sono scrivibili come:

$$-\frac{\Delta}{2}\psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) + v(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) + \Sigma_z(\mathbf{r})\sigma_z\psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = \varepsilon_{i\sigma}\psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) \quad (3.16)$$

Se moltiplichiamo a sinistra per $\psi_i^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}')$ da entrambe le parti e sommiamo su i , σ e σ'

$$\begin{aligned} \sum_{i\sigma\sigma'} [-\psi_i^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}') \frac{\Delta}{2} \psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) + \psi_i^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}') v(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) + \\ + \psi_i^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}') \Sigma_z(\mathbf{r}) \sigma_z \psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma})] = \sum_{i\sigma\sigma'} \psi_i^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}') \varepsilon_{i\sigma} \psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) \end{aligned} \quad (3.17)$$

otteniamo, ricordando la definizione di densità di spin e considerando che σ_z è diagonale, che:

$$v(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) + \Sigma_z(\mathbf{r})s_z(\mathbf{r}) = \sum_{i\sigma} [\psi_i^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) \frac{\Delta}{2} \psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) + \psi_i^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) \varepsilon_{i\sigma} \psi_i(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma})] \quad (3.18)$$

Incidentalmente, osserviamo che, se indichiamo con $n_{\uparrow}(\mathbf{r})$ e $n_{\downarrow}(\mathbf{r})$ rispettivamente le densità di nucleoni con spin up e down, possiamo scrivere:

$$n(\mathbf{r}) = n_{\uparrow}(\mathbf{r}) + n_{\downarrow}(\mathbf{r}) \quad (3.19a)$$

$$s_z(\mathbf{r}) = n_{\uparrow}(\mathbf{r}) - n_{\downarrow}(\mathbf{r}) \quad (3.19b)$$

il che porta ad un'equazione della forma:

$$\begin{aligned} [v(\mathbf{r}) + \Sigma_z(\mathbf{r})]n_{\uparrow}(\mathbf{r}) + [v(\mathbf{r}) - \Sigma_z(\mathbf{r})]n_{\downarrow}(\mathbf{r}) = \\ = \sum_{i\sigma} [\psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \frac{\Delta}{2} \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) + \psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \varepsilon_{i\sigma} \psi_i(\mathbf{r}, \sigma)] \end{aligned} \quad (3.20)$$

che può essere sintetizzata come

$$v_{\uparrow}(\mathbf{r})n_{\uparrow}(\mathbf{r}) + v_{\downarrow}(\mathbf{r})n_{\downarrow}(\mathbf{r}) = \sum_{i\sigma} [\psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \frac{\Delta}{2} \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) + \psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \varepsilon_{i\sigma} \psi_i(\mathbf{r}, \sigma)] \quad (3.21)$$

con, naturalmente,

$$v_{\uparrow}(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) + \Sigma_z(\mathbf{r}) \quad (3.22a)$$

$$v_{\downarrow}(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) - \Sigma_z(\mathbf{r}) \quad (3.22b)$$

In questo modo otteniamo, di fatto, due potenziali che si differenziano a seconda che la particella considerata abbia spin rivolto verso l'alto o verso il basso (che, in effetti, è quello che ci aspettavamo volendo includere una dipendenza dallo spin).

Ora, considerando il punto di avvio di questa discussione, ovvero l'equazione 3.18, un'equazione di particella singola che descrive la dinamica del sistema, la somma sull'indice σ nella 3.21 corrisponde alla richiesta di considerare prima gli stati con spin up e poi quelli con spin down. Pertanto, separando i contributi dei due orientamenti di spin, otteniamo:

$$v_{\uparrow}(\mathbf{r})n_{\uparrow}(\mathbf{r}) = \sum_i [\psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \frac{\Delta}{2} \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) + \psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \varepsilon_{i\sigma} \psi_i(\mathbf{r}, \sigma)]_{\sigma=\uparrow} \quad (3.23a)$$

$$v_{\downarrow}(\mathbf{r})n_{\downarrow}(\mathbf{r}) = \sum_i [\psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \frac{\Delta}{2} \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) + \psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \varepsilon_{i\sigma} \psi_i(\mathbf{r}, \sigma)]_{\sigma=\downarrow} \quad (3.23b)$$

Alternativamente saremmo potuti arrivare alle stesse equazioni ipotizzando che le equazioni di particella singola dovessero avere (sempre considerando di orientare

l'asse z in modo che coincida con lo spin del nucleo) dei potenziali differenti a seconda di spin up o down, riacquistando la loro forma puramente spaziale:

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + v_{\uparrow}(\mathbf{r}) \right] \psi_i^{\uparrow}(\mathbf{r}) = \varepsilon_i^{\uparrow} \psi_i^{\uparrow}(\mathbf{r}) \quad (3.24a)$$

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + v_{\downarrow}(\mathbf{r}) \right] \psi_i^{\downarrow}(\mathbf{r}) = \varepsilon_i^{\downarrow} \psi_i^{\downarrow}(\mathbf{r}) \quad (3.24b)$$

Moltiplicando a sinistra per $\psi_i^{\sigma*}(\mathbf{r})$, con σ up o down, e sommando su i ritroviamo le equazioni 3.23. Questo risultato è, peraltro, confrontabile con quanto riportato nell'articolo [11] per quanto riguarda sistemi elettronici.

Procediamo ora, seguendo le considerazioni della sezione 2.4, a differenziare la trattazione per protoni e neutroni. Prima di includere una dipendenza esplicita dallo spin avevamo un potenziale radiale differente per protoni e neutroni e nelle equazioni di Kohn-Sham inverse comparivano, separatamente le densità di protoni e neutroni a seconda del potenziale considerato:

$$v^{\pi}(\mathbf{r}) n^{\pi}(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i^{\pi*}(\mathbf{r}) \left[\frac{\Delta}{2} + \varepsilon_i^{\pi} \right] \psi_i^{\pi}(\mathbf{r}) \quad (3.25a)$$

$$v^{\nu}(\mathbf{r}) n^{\nu}(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i^{\nu*}(\mathbf{r}) \left[\frac{\Delta}{2} + \varepsilon_i^{\nu} \right] \psi_i^{\nu}(\mathbf{r}) \quad (3.25b)$$

Ora, dall'articolo [8] si ricava che, in generale, il termine Σ dipende dal tipo di particella considerata (la quale caratteristica rientra nel tentativo di dare una descrizione di campo medio più generale possibile). Ovviamente, ad ogni modo, non c'è motivo di pensare che lo spin dei protoni, ad esempio, non interagisca con quello dei neutroni (e viceversa): questa "interazione" è, come, celata all'interno dei "potenziali" Σ_{ν} e Σ_{π} stessi: infatti, dallo stesso articolo, si arriva ad individuare una dipendenza funzionale di Σ da $\mathbf{s}_{tot}(\mathbf{r})$, che, in un eventuale processo autoconsistente per individuare la forma di Σ dovrebbe essere automaticamente inclusa (così come la dipendenza da $n(\mathbf{r})$ di $v_{KS}(\mathbf{r})$ è implicita nel processo, senza mai venire richiesta esplicitamente). Pertanto, nelle equazioni 3.18 compariranno i prodotti

$$\Sigma_{\nu} \cdot \mathbf{s}_{\nu} \quad \Sigma_{\pi} \cdot \mathbf{s}_{\pi}$$

ma la dipendenza funzionale dalla densità di spin totale è comunque mantenuta:

$$\Sigma_{\nu} = \Sigma_{\nu}[\mathbf{s}_{tot}] \quad (3.26a)$$

$$\Sigma_\pi = \Sigma_\pi[\mathbf{s}_{tot}] \quad (3.26b)$$

e sarà ottenuta in un processo convergente al dato empirico/sperimentale.

Riassumendo: dovremo considerare le equazioni 3.23, in cui si distinguerà tra densità di protoni e neutroni, e, per ciascuna categoria, per particelle spin up e spin down. Siamo quindi arrivati ad avere, di fatto, un sistema di quattro equazioni:

$$v_\uparrow^\nu(\mathbf{r})n_\uparrow^\nu(\mathbf{r}) = \sum_i [\psi_{\uparrow i}^{*\nu}(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} \psi_{\uparrow i}^\nu(\mathbf{r}) + \psi_{\uparrow i}^{*\nu}(\mathbf{r}) \varepsilon_{\uparrow i}^\nu \psi_{\uparrow i}^\nu(\mathbf{r})] \quad (3.27a)$$

$$v_\downarrow^\nu(\mathbf{r})n_\downarrow^\nu(\mathbf{r}) = \sum_i [\psi_{\downarrow i}^{*\nu}(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} \psi_{\downarrow i}^\nu(\mathbf{r}) + \psi_{\downarrow i}^{*\nu}(\mathbf{r}) \varepsilon_{\downarrow i}^\nu \psi_{\downarrow i}^\nu(\mathbf{r})] \quad (3.27b)$$

$$v_\uparrow^\pi(\mathbf{r})n_\uparrow^\pi(\mathbf{r}) = \sum_i [\psi_{\uparrow i}^{*\pi}(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} \psi_{\uparrow i}^\pi(\mathbf{r}) + \psi_{\uparrow i}^{*\pi}(\mathbf{r}) \varepsilon_{\uparrow i}^\pi \psi_{\uparrow i}^\pi(\mathbf{r})] \quad (3.27c)$$

$$v_\downarrow^\pi(\mathbf{r})n_\downarrow^\pi(\mathbf{r}) = \sum_i [\psi_{\downarrow i}^{*\pi}(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} \psi_{\downarrow i}^\pi(\mathbf{r}) + \psi_{\downarrow i}^{*\pi}(\mathbf{r}) \varepsilon_{\downarrow i}^\pi \psi_{\downarrow i}^\pi(\mathbf{r})] \quad (3.27d)$$

a cui ci riferiremo generalmente con

$$v_\sigma^t(\mathbf{r})n_\sigma^t(\mathbf{r}) = \sum_i [\psi_{\sigma i}^{*t}(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} \psi_{\sigma i}^t(\mathbf{r}) + \psi_{\sigma i}^{*t}(\mathbf{r}) \varepsilon_{\sigma i}^t \psi_{\sigma i}^t(\mathbf{r})] \quad (3.28)$$

dove l'indice t indica il tipo di nucleone.

L'inserimento all'interno di un algoritmo iterativo è ora del tutto analogo a quanto fatto in precedenza, per cui arriviamo alla scrittura

$$v_\sigma^{tk+1}(\mathbf{r}) = \frac{n_\sigma^{tk}(\mathbf{r})}{\tilde{n}_\sigma^t(\mathbf{r})} v_\sigma^{tk}(\mathbf{r}) \quad (3.29)$$

con k indice di iterazione e $\tilde{n}_\sigma^t(\mathbf{r})$ la densità target di nucleoni con spin up o down. Una volta determinati i potenziali $v_\downarrow(\mathbf{r})$ e $v_\uparrow(\mathbf{r})$ è possibile tornare a $v(\mathbf{r})$ e $\Sigma_z(\mathbf{r})$ mediante sostituzione

$$v(\mathbf{r}) = \frac{v_\uparrow(\mathbf{r}) + v_\downarrow(\mathbf{r})}{2} \quad (3.30a)$$

$$\Sigma_z(\mathbf{r}) = \frac{v_\uparrow(\mathbf{r}) - v_\downarrow(\mathbf{r})}{2} \quad (3.30b)$$

Si pone tuttavia una questione: ad ogni passo è richiesto il calcolo di $n_\sigma^{tk}(\mathbf{r})$, per il quale è necessario risolvere le equazioni di Schrödinger

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + v_\sigma^{tk}(\mathbf{r}) \right] \psi_{\sigma i}^{tk}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\sigma i}^{tk} \psi_{\sigma i}^{tk}(\mathbf{r}) \quad (3.31)$$

le quali richiedono di individuare le autofunzioni con un determinato orientamento dello spin mentre fino ad ora abbiamo sempre operato su una base di numeri quantici n , l e j . Tuttavia, avendo già osservato che l'algoritmo è autoconsistente, la dipendenza dallo spin risulta automaticamente inclusa nel processo computazionale stesso, dal momento che la soluzione deve convergere alle densità che selezionano un determinato orientamento dello spin. Si noti che ora gli orbitali $\psi_{\sigma i}$ differiscono a seconda che si consideri uno stato di spin up o down, pertanto gli autostati di spin non sono più degeneri. Sia che si considerino stati di spin up o down essi costituiscono delle basi ortonormali tali che

$$\langle \psi_i^\uparrow | \psi_j^\uparrow \rangle = \delta_{ij} \quad (3.32a)$$

$$\langle \psi_i^\downarrow | \psi_j^\downarrow \rangle = \delta_{ij} \quad (3.32b)$$

ma in generale non ortogonali tra loro:

$$\langle \psi_i^\downarrow | \psi_j^\uparrow \rangle \neq 0 \quad (3.33)$$

Per quanto riguarda il calcolo delle densità osserviamo che per costruire lo stato fondamentale occorre sommare le N autofunzioni con autoenergie più basse, contemplando le rispettive degenerazioni, dalle quali però è ora esclusa quella di spin, in quanto rimossa. Le densità, una volta integrate, restituiranno il numero di particelle con rispettivo spin:

$$\int n_\sigma(r) d\mathbf{r} = N_\sigma \quad (3.34)$$

Sarà pertanto necessario capire a priori, prima di avviare il processo iterativo, quante particelle si trovano nello stato di spin up e quante nello stato di spin down, a partire dall'osservazione dello spin complessivo nel nucleo o integrando le densità empiriche disponibili, così da sapere quante e quali autofunzioni includere per il calcolo delle densità con spin up e down. Poiché le funzioni d'onda sono fattorizzate nella forma

$$\psi(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \chi(\sigma) \quad (3.35)$$

la scrittura esplicita delle densità è:

$$n_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_{nlm} \frac{u_{nl}^2(r)}{r^2} |Y_{lm}(\Omega)|^2 |\chi(\sigma)|^2 \quad (3.36)$$

Integriamo su tutto l'angolo solido per individuare la sola dipendenza radiale sfruttando la relazione di ortonormalità delle armoniche sferiche

$$\int Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) d\Omega = 4\pi \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (3.37)$$

e otteniamo, per le shell complete,

$$n_\sigma(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{nlm} \frac{u_{nl}^2(r)}{r^2} |\chi(\sigma)|^2 = \frac{1}{4\pi} \sum_{nl} (2\ell + 1) \frac{u_{nl}^2(r)}{r^2} |\chi(\sigma)|^2 \quad (3.38)$$

mentre per le shell di valenza non complete è sufficiente sostituire il fattore $(2\ell + 1)$ con il numero di particelle effettivamente presenti su quell'orbitale. Osserviamo che nella base utilizzata, ovvero $|l l_z s s_z\rangle$, il termine spin-orbita *non* è diagonale: si è pertanto scelto di trascurarlo.

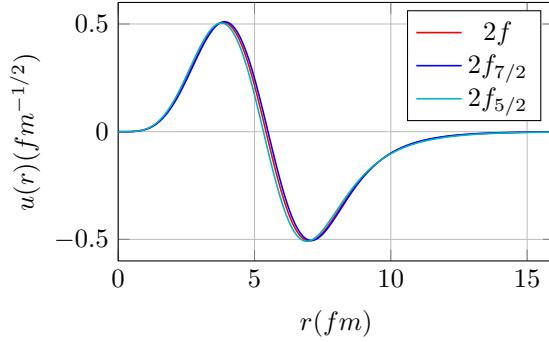


Figura 3.1 – Funzione d'onda radiale ridotta $u(r)$ per neutroni del ^{208}Pb con e senza l'aggiunta del termine spin-orbita

Questa scelta non comporta un effetto significativo sulla forma finale di $\Sigma_z(r)$ dal momento che il termine spin-orbita non modifica significativamente le funzioni d'onda (che, attraverso la densità $n_\sigma(r)$, modificano il potenziale nel processo iterativo) ma solo gli autovalori dell'energia. L'effetto del termine spin-orbita sulle autofunzioni è mostrato in figura 3.1: si osservi come non vi siano differenze significative fra le autofunzioni

in presenza o meno del termine spin-orbita, anche per uno stato, come quello rappresentato, avente un numero quantico ℓ molto grande (le autofunzioni sono relative ad uno stato $2f$).

3.2 Scrittura del codice

Schematicamente la procedura iterativa è riportata in figura 3.2: dapprima si procede a calcolare le autofunzioni di un potenziale iniziale che riproduca verosimilmente una prima forma per un campo medio; note le autofunzioni si sommano

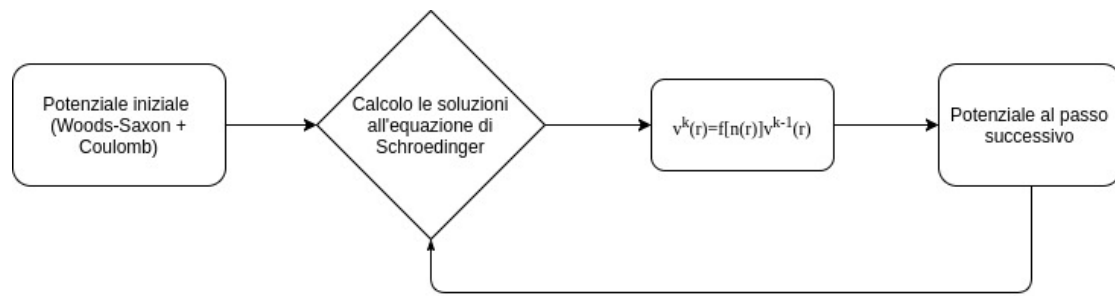


Figura 3.2 – Schema del processo iterativo

secondo la 3.15 per ottenere la densità teorica, la quale è confrontata con quella empirica tramite la 3.13 andando a determinare il potenziale per il passo seguente. Segue il calcolo delle autofunzioni per il nuovo potenziale le quali determinano a loro volta una densità teorica per il passo successivo dell'algoritmo. Il processo si ripete fino a che non sia stata raggiunta la convergenza. Per quanto concerne l'aspetto pratico il codice è stato sviluppato in linguaggio C++: si è inoltre scelto di implementare completamente da capo un nuovo codice, in tutte le sue parti, di modo da avere una visione organica sul programma nel suo complesso.

3.2.1 Risoluzione dell'equazione di Schrödinger

In simmetria sferica l'equazione di Schrödinger si trasforma in un'equazione monodimensionale nella sola coordinata r , e, ricorrendo alla funzione d'onda ridotta $u(r) = rR(r)$, risulta anche particolarmente compatta:

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} + v_{KS}(r) \right] u(r) = Eu(r) \quad (3.39)$$

La 3.39 è un'equazione differenziale ordinaria del secondo ordine, con condizioni al contorno

$$\lim_{r \rightarrow 0} u(r) \propto r^{\ell+1} \quad (3.40a)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} u'(r) \propto (\ell+1)r^{\ell} \quad (3.40b)$$

ed è stata risolta mediante metodo Runge-Kutta al quarto ordine. Detto h il passo scelto per la risoluzione dell'equazione la soluzione risulta avere una precisione dell'ordine $O(h^4)$. Il passo h viene dunque anche utilizzato come passo di integrazione ogni qual volta sia richiesto il calcolo di un integrale, calcolato mediante

metodo dei trapezoidi, di modo da ottenere una precisione di $O(h^2)$. L'equazione di Schrödinger è però un'equazione agli autovalori, i quali costituiscono un'ulteriore incognita del problema. Per individuarli si è sfruttato il fatto che, in prima approssimazione, il potenziale nucleare è assimilabile ad una buca di potenziale. Al di fuori della buca le autofunzioni corrispondenti a questo problema sono esponenzialmente sopresse a 0: tale andamento impone pertanto una condizione al contorno anche per le autofunzioni relative al problema in nostro interesse. Pertanto se l'equazione 3.39 è risolta con un corretto autovalore dell'energia, si ha che al di fuori del raggio nucleare deve tendere a 0. Se l'equazione è integrata fino ad un raggio r_{max} , corrispondente nella presente trattazione a circa tre volte il raggio nucleare, possiamo ricorrere alla condizione

$$|u(r_{max})| < \epsilon \quad (3.41)$$

con tipicamente $\epsilon \sim 10^{-6}$. Se l'equazione 3.39 calcolata con un qualsiasi valore E soddisfa questa condizione, possiamo affermare che tale E costituisce un autovalore del problema.

Per determinare gli autovalori dell'energia si è ricorso ad un algoritmo di *shooting*, il quale prevede il seguente schematismo:

1. Inseriti due valori di prova per l'energia E_1 ed E_2 se ne calcolano le relative autofunzioni.
2. Si verifica se le autofunzioni così ottenute sono discordi in r_{max} : in caso positivo l'autovalore è compreso fra E_1 ed E_2 .
3. Si calcola l'autofunzione relativa a $E_t = \frac{E_1 + E_2}{2}$ e se ne verifica il segno in r_{max} .
4. E_t sostituisce quindi l'autovalore fra E_1 ed E_2 a sè concorde in r_{max} .

Si dà così avvio ad un processo di bisezione che termina solo quando risulta soddisfatta la condizione 3.41. Qualora la condizione 1 non venisse soddisfatta per le energie di prova iniziali si procede su un intervallo differente. Le autofunzioni così trovate sono quindi normalizzate; in simmetria sferica la normalizzazione è facilmente espressa dalla condizione

$$\int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1 \quad (3.42)$$

Una volta normalizzate le autofunzioni soddisfano inoltre la condizione di normalizzazione complessiva sul numero di particelle

$$\int n(r) d\mathbf{r} = \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) \int u_{\alpha}^2(r) dr = \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) \quad (3.43)$$

Il valore del passo di integrazione h differisce a seconda del dato di partenza: per i dati provenienti da evidenze sperimentali è stato possibile scendere fino ad $h = 0.005 fm$, poiché i profili di densità, costruiti come fit dei punti sperimentali, hanno, di fatto, un'espressione analitica. Per i dati provenienti da simulazioni di tipo Monte-Carlo si è ricorsi direttamente al valore di h con il quale le densità sono fornite: $h = 0.05 fm$ per ^{16}O e $h = 0.1 fm$ per ^{40}Ca .

3.2.2 Potenziale iniziale

Per sua natura l'algoritmo implementato risulta essere autoconsistente, ovvero dovrebbe essere in grado di arrivare ad una soluzione univoca del potenziale finale dipendente soltanto dalla densità empirica scelta, e non dal potenziale di partenza, coerentemente con il primo teorema di Hohenberg e Kohn. Tuttavia, da un punto di vista prettamente computazionale, il potenziale di partenza non deve essere eccessivamente dissimile da quello che ci aspettiamo di ottenere se desideriamo che l'algoritmo giunga alla convergenza, ovvero deve avere una forma che fisicamente fornisca un buon punto di partenza per descrivere, almeno in prima approssimazione, il sistema nucleare. In questo senso il potenziale di Woods-Saxon costituisce un buon inizio: ancora oggi esso rappresenta un modello di potenziale in approssimazione di campo medio notevolmente studiato e alcuni gruppi di ricerca tuttora sono impegnati nell'individuare i parametri che consentano un'adesione ottimale dei suoi autovalori dell'energia con i dati sperimentali [12]. Esso è inclusivo di un termine di repulsione Coulombiana per i protoni e di un termine dovuto all'interazione spin-orbita che riproduce gli splitting ad esso associati [13, 3].

Nel suo complesso, quindi, il potenziale di prova è descritto da [2]:

$$v(r) = v_{WS}(r) + v_{LS}(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + v_C(r) \quad (3.44)$$

con $v_{WS}(r)$ e $v_{LS}(r)$ dalle equazioni 2.1 e 2.3 rispettivamente.

Per quanto riguarda la repulsione Coulombiana occorre analizzare il problema con una maggiore attenzione: nella approssimazione più semplice il nucleo può essere considerato come una sfera uniformemente carica, con densità di carica:

$$n_{ch}(r) = \frac{Zq_e}{\frac{4}{3}\pi R_n^3} \quad (3.45)$$

In questa approssimazione il potenziale è ottenibile per via analitica e assume la forma:

$$v_C(r) = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{Zq_e^2}{R_n} \left[3 - \left(\frac{r}{R_n} \right)^2 \right] & r \leq R_n \\ \frac{Zq_e^2}{r} & r > R_n \end{cases} \quad (3.46)$$

Un primo tentativo di miglioramento può essere considerata la correzione della 3.46 come suggerito da [14], ovvero mediante una semplice sostituzione di R_n con

$$R_U = R_n \sqrt{\frac{1 + (5s^2/2R_n^2)}{1 + (3s^2/4R_n^2)}} \quad (3.47)$$

dove $s = 2.0$ fm, appositamente formulata per riprodurre i risultati che si avrebbero scegliendo una distribuzione di Fermi per la carica nucleare. Questa approssimazione, tuttavia, non tiene in considerazione la presenza di un termine di scambio oltre che di quello diretto. In un articolo del 1951 [15] Slater propone la seguente semplificazione per il potenziale Coulombiano:

$$v_C(\mathbf{r}) = q_e^2 \left[\int \frac{n_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' - \frac{3}{2} \left(\frac{3}{\pi} n_p(\mathbf{r}) \right)^{1/3} \right] \quad (3.48)$$

con $n_p(r)$ densità di protoni. Il secondo termine rappresenta il termine di scambio, mentre il primo la parte diretta, la quale può essere esplicitata come:

$$v_{dir}(r) = q_e^2 \left(\frac{1}{r} \int_0^r 4\pi n_p(r') r'^2 dr' + \int_r^\infty 4\pi n_p(r') r' dr' \right) \quad (3.49)$$

Testando l'algoritmo con entrambe le definizioni di $v_C(r)$ osserviamo un fatto significativo: il potenziale finale risulta essere lo stesso, come osservabile in figura 3.3. Questo è una conferma del primo teorema di Hohenberg e Kohn, nonché una prova dell'autoconsistenza dell'algoritmo.

Si è inoltre provato ad osservare quale fosse il risultato qualora venisse rimosso, nel caso di protoni, la componente Coulombiana corredata di scambio dal potenziale finale: il risultato è un potenziale ben sovrapponibile a quello ottenuto per

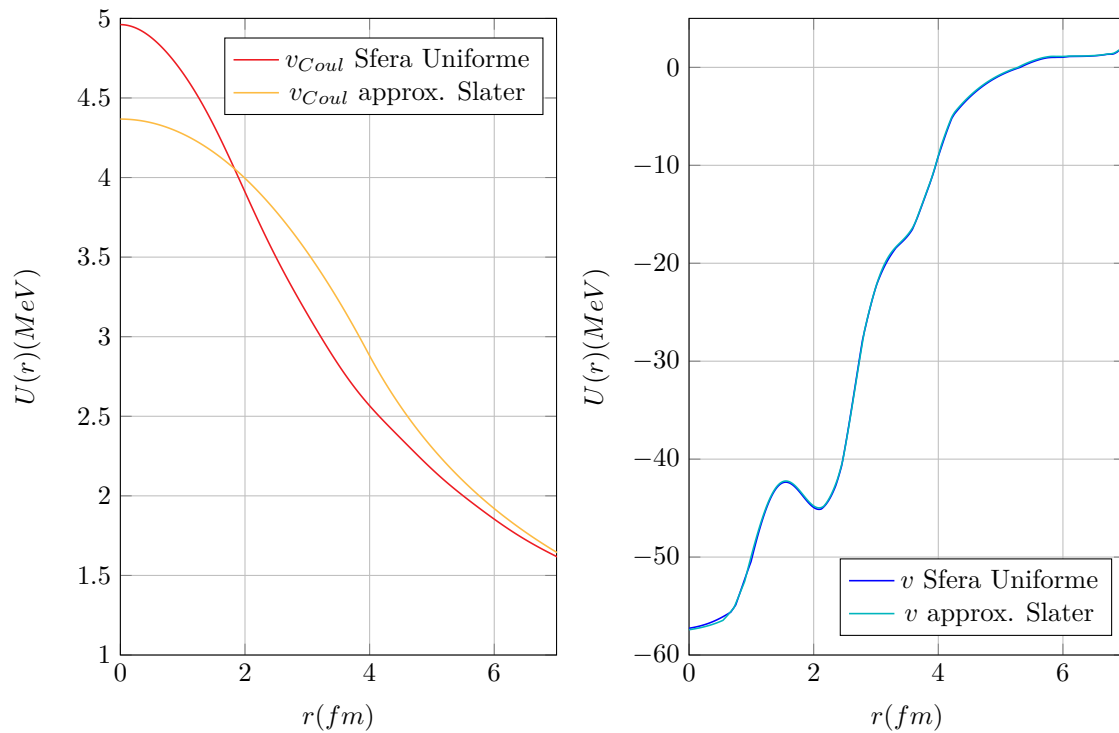


Figura 3.3 – Termini Coulombiani e potenziali di protone per il ^{16}O : i potenziali risultano praticamente sovrapposti nonostante la diversità dei termini coulombiani iniziali.

i neutroni senza il termine Coulombiano iniziale, il che significa che il potenziale coulombiano nella forma 3.48 corrisponde ad un'ottima approssimazione per il sistema nucleare.

3.3 Scelta delle densità empiriche

Per quanto riguarda le densità poste come target dell'algoritmo abbiamo fatto uso di dati provenienti sia da indagini sperimentali sia da simulazioni di tipo Monte Carlo. Descriviamo brevemente le possibilità a riguardo.

3.3.1 Simulazioni Monte Carlo

In tempi relativamente recenti è divenuto possibile calcolare le proprietà di nuclei leggeri e della materia nucleare utilizzando metodi Monte Carlo quantistici, i quali, a partire da un'interazione nucleare realistica, si basano su una formulazione nel continuo mediante *path integrals* di Feynman. Alcune delle densità utilizzate in questo lavoro sono state ottenute proprio a partire da queste tecniche computazionali. L'interazione nucleare utilizzata è quella prodotta dal gruppo di Argonne (AV18). Le densità per ^{16}O derivano dai calcoli di un gruppo del *Los Alamos National Laboratory* [16] mentre quelle per il ^{40}Ca dal gruppo di Argonne stesso [17] [18]. Sempre dal gruppo di Argonne arrivano le densità relative ai nuclei di ^6Li e ^7Li . Diversamente dalle densità sperimentali forniscono un numero sufficiente di punti da consentire di utilizzare le densità ottenute senza la necessità di ricorrere a parametrizzazione alcuna.

3.3.2 Scattering elettronico e scattering adronico

La maggior parte dei dati sperimentali a disposizione provengono da esperimenti di scattering di elettroni. Questi dati sono stati raccolti e opportunamente parametrizzati da De Vries et al. in [19]. Il vantaggio di usare elettroni per lo studio della struttura nucleare risiede nel fatto che l'interazione col nucleo, puramente elettromagnetica, è ben nota. Inoltre l'interazione elettrone-nucleo è relativamente debole: per questo motivo effetti di scattering multiplo sono solitamente trascurati, ed il processo di scattering è descritto in termini di teoria delle perturbazioni al primo ordine. Nel processo in esame gli elettroni vengono accelerati verso dei nuclei bersaglio, risentono del campo Coulombiano da essi generato e sono pertanto deflessi. Attraverso misure di sezione d'urto ai vari angoli di scattering è possibile risalire ad un profilo di densità di carica per i nuclei bersaglio.

In approssimazione PWBA (*Plane Wave Born Approximation*), in cui possiamo porci grazie alla natura perturbativa dell'interazione elettrone-nucleo, il legame tra sezione d'urto e densità di carica è immediato. Possiamo quindi scrivere (in simmetria sferica)

$$\frac{d\sigma(q)}{d\Omega} = \sigma_M |F(q)|^2 \quad (3.50)$$

con σ_M sezione d'urto di Mott, q momento trasferito nel processo di scattering e $F(q)$ fattore di forma nucleare, definito dalla trasformata di Fourier della densità:

$$F(q) = 4\pi \int_0^\infty r \frac{\sin(qr)}{q} n(r) dr \quad (3.51)$$

In questa approssimazione il problema inverso è facilmente risolto: è possibile estrarre il fattore di forma a partire dalla sezione d'urto e, con un'antitrasformata di Fourier, ottenere la densità di carica

$$n(r) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty q \frac{\sin(qr)}{r} F(q) dq \quad (3.52)$$

Le limitazioni intrinseche dell'approccio al problema inverso sono evidenti dall'equazione 3.52: le misure, chiaramente, non coprono un range infinito di momento q trasferito, pertanto forniscono dettagli sull'andamento di $\tilde{n}_C(r)$ solo per un intervallo di valori finiti di r , in particolare da $r_{min} = 2\pi/q_{max}$ a $r_{max} = 2\pi/q_{min}$, e presentano incertezze più pronunciate per r prossimi all'origine (alto momento trasferito). Naturalmente i dati ottenuti corrispondono a delle densità di carica e sono riferiti ai soli protoni: per passare alla densità di probabilità, come richiesto dalle equazioni di Kohn-Sham inverse, è necessario tradurre l'informazione, nella maniera che verrà illustrata più avanti. Inoltre, per estendere la trattazione anche al caso dei neutroni, occorre immaginare che le densità di probabilità di protoni e neutroni siano identiche: questa approssimazione è una richiesta particolarmente forte e impone, quantomeno, di restringere la trattazione a soli nuclei con egual numero di protoni e neutroni e leggeri, così che l'interazione Coulombiana non giochi un ruolo significativo. Concretamente questo comporta la scelta di soffermarci sui nuclei di ^{16}O , ^{40}Ca . Per il ^{48}Ca si studierà il solo potenziale di protone.

Analoghi esperimenti per sondare le densità di neutroni sono conducibili tramite scattering adronico. Essi, tuttavia, hanno delle incertezze tipicamente dieci volte più grandi di quelle relative a scattering elettronico: il problema centrale consiste nella conoscenza incompleta delle ampiezze di scattering per l'interazione nucleone-nucleone nel mezzo nucleare. Per estrarre informazioni precise riguardo la densità di neutroni occorre, pertanto, scegliere attentamente un'interazione efficace. Risultati significativi sono riportati nell'articolo [20] per esperimenti di scattering elastico protone-nucleo a medie energie ($E \sim 300$ MeV): questo è un

buon metodo per estrarre informazioni sia riguardo la superficie, sia riguardo l'interno del nucleo. L'energia dei protoni incidenti, infatti, è sufficientemente bassa da ridurre la produzione di mesoni, ma alta abbastanza da essere descritta sotto l'approssimazione di impulso (RIA, *Relativistic Impulse Approximation*). I dati sono forniti per il ^{208}Pb : unitamente ai dati relativi alla densità di carica dello stesso nucleo permettono di estendere la trattazione anche ai nuclei pesanti.

3.4 Parametrizzazione delle densità

Oltre ad una parametrizzazione di prova con funzioni di tipo Fermi, della forma

$$n_{\text{Fermi}}(r) = \frac{c_0}{1 + e^{\frac{r-c_1}{c_2}}} \quad (3.53)$$

si è in generale fatto ricorso a delle parametrizzazioni che fossero *model-independent*: una parametrizzazione di tipo Fermi, infatti, rischia di imporre al dato sperimentale andamenti significativamente differenti da quelli originali, inserendo forzatamente un modello fenomenologico. Queste parametrizzazioni, invece, consentono di riprodurre in maniera più efficace il dato empirico.

Nella procedura *model-independent* la distribuzione di probabilità è espansa in serie su una base di funzioni ortonormali

$$n(r) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n P_n(r) \quad (3.54)$$

ed i coefficienti A_n sono fissati di modo da riprodurre la sezione d'urto. È evidente che un'espansione in infiniti termini risulta priva di applicazione. Da un punto di vista pratico la serie deve essere troncata, anche se questo produce un errore nella determinazione della densità.

Poiché le misure sono, chiaramente, effettuate in un intervallo limitato di q , dalla 3.52 si evince che il processo stesso introduce un'incertezza (ancora precedente a quella sperimentale) nella determinazione della distribuzione di densità. Troncare pertanto la 3.54 è fisicamente compatibile con la descrizione del processo di scattering. Come conseguenza dai dati possono essere estratte soltanto quelle componenti della trasformata di Fourier con lunghezze d'onda comprese tra $2\pi/q_{\text{max}}$ e $2\pi/q_{\text{min}}$.

Tra le varie basi di funzioni ortonormali, quali ad esempio funzioni di Fourier-Bessel, funzioni di Hermite, Gaussiane, si è scelto di ricorrere a queste ultime, poiché presentano alcune proprietà notevoli, in particolare permettono di passare agevolmente nello spazio di Fourier mantenendo la propria forma e rispecchiano molto bene l'andamento della densità per distanze superiori al raggio nucleare [21].

3.4.1 Parametrizzazione SOG

Per la parametrizzazione delle densità sperimentali si è quindi fatto ricorso ad una somma di Gaussiane (SOG, *Sum of Gaussians*), introdotta per la prima volta da Sick [22]. Tale parametrizzazione ci sembra particolarmente appropriata per un motivo fondamentale: in prima approssimazione il potenziale di campo medio nucleare è assimilabile ad un semplice potenziale armonico. Per l'oscillatore armonico è nota la forma analitica delle soluzioni del problema agli autovalori: le autofunzioni tutte presentano per grandi r un andamento di tipo gaussiano

$$\psi(r) \propto e^{-\frac{r^2}{a^2}} \quad (3.55)$$

Anche le densità di probabilità, pertanto, avranno questo particolare andamento. Una parametrizzazione di questo tipo, quindi, riproduce fedelmente tale caratteristica. In figura 3.4 è possibile verificare quanto le funzioni d'onda dei potenziali considerati abbiano in comune con le autofunzioni di oscillatore armonico.

La larghezza γ delle gaussiane è stata scelta come la più piccola larghezza dei picchi delle funzioni d'onda nucleari radiali fra gli stati occupati (ottenute nell'articolo di riferimento De Vries con metodo di Hartree-Fock). Un ulteriore vantaggio nell'uso di gaussiane risiede nel fatto che a differenti r i contributi delle diverse funzioni sommate per dare $n(r)$ sono fortemente disaccoppiati, grazie alla rapida decrescita delle code Gaussiane. In questo approccio si applica quindi la parametrizzazione

$$n(r) = \frac{1}{2\pi^{3/2}\gamma^3} \sum_i A_i \left\{ e^{-\left(\frac{r-R_i}{\gamma}\right)^2} + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\gamma}\right)^2} \right\} \quad (3.56)$$

con i coefficienti A_i definiti da:

$$A_i = \frac{ZQ_i}{1 + 2\frac{R_i^2}{\gamma^2}} \quad (3.57)$$

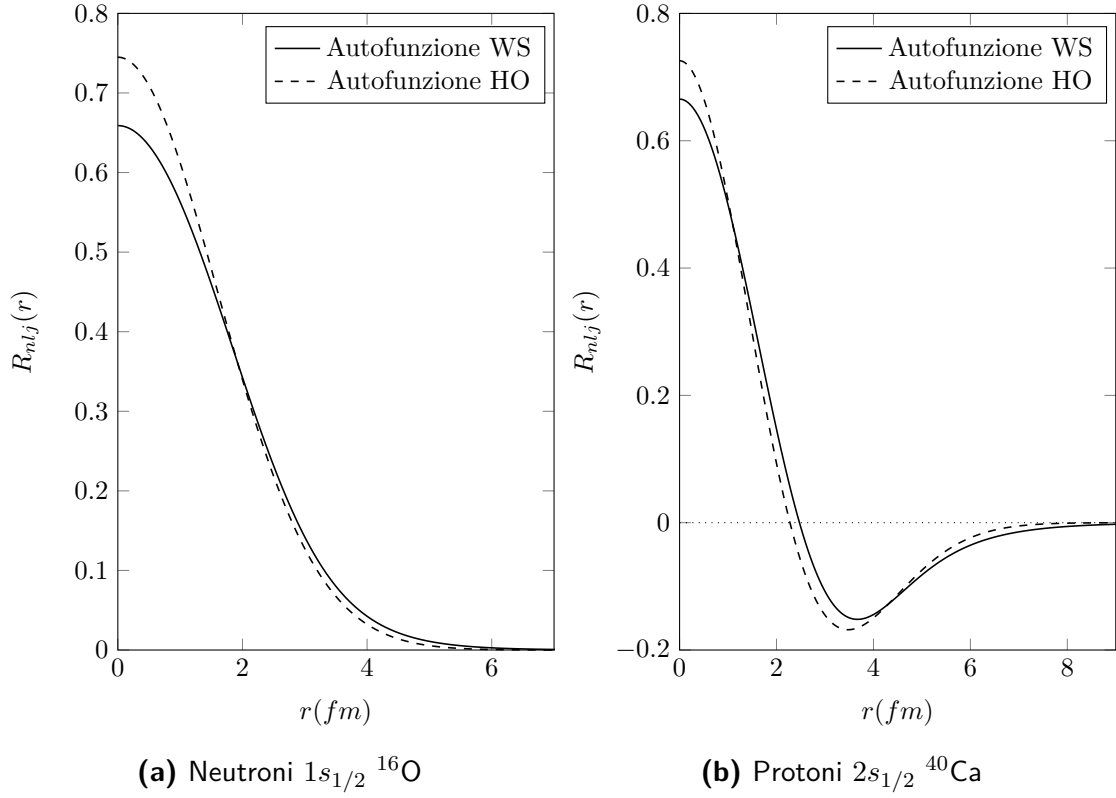


Figura 3.4 – Grafici selezionati di autofunzioni per potenziali Woods-Saxon (WS) e di Oscillatore Armonico (HO). È palese la somiglianza tra le due funzioni che consente di ipotizzare un andamento analogo al di fuori del raggio nucleare, motivando la scelta della parametrizzazione.

I parametri R_i e Q_i sono riportati nell'articolo [19] per una gran varietà di nuclei; i parametri Q_i indicano la frazione di carica contenuta nella i -esima gaussiana, normalizzate in maniera che

$$\sum_i Q_i = 1 \quad (3.58)$$

La larghezza γ delle gaussiane è indicata nello stesso articolo come

$$\gamma = \left(\frac{2}{3}\langle r^2 \rangle\right)^{1/2} \quad (3.59)$$

ed è quindi legata al raggio quadratico medio dei nuclei in esame (anche questo dato è riportato nell'articolo).

La parametrizzazione 3.56, tuttavia, riflette direttamente la densità di probabilità soltanto per l'esperimento di scattering protonico per la densità di neutroni

del ^{208}Pb . Per tutti gli altri dati, derivanti da esperimenti di scattering elettronico, riflette invece la densità di carica. La densità di carica è legata alla densità di probabilità da una convoluzione con il fattore di forma del protone poiché quest'ultimo non è una particella puntiforme:

$$n_{ch}(\mathbf{r}) = \int n(\mathbf{r}') n_{protone}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (3.60)$$

dove $n_{protone}$ è il fattore di forma. Nell'interesse della densità di probabilità occorre invertire la 3.60, la quale operazione è più agevole se condotta nello spazio di Fourier:

$$\tilde{n}(\mathbf{q}) = \frac{\tilde{n}_c h(\mathbf{q})}{\tilde{n}_{protone}(\mathbf{q})} \quad (3.61)$$

La quantità in interesse si ottiene poi antitrasformando $\tilde{n}(\mathbf{q})$. Se si considera un fattore di forma del protone descritto da una distribuzione gaussiana di larghezza $\alpha = (\frac{2}{3}\langle r_p^2 \rangle)^{1/2}$ (in analogia alla trattazione precedente)

$$n_{protone}(r) = \frac{q_e}{\alpha^3 \pi^{3/2}} e^{-\frac{r^2}{\alpha^2}} \quad (3.62)$$

si arriva infine ad una densità di protoni

$$n(r) = \frac{1}{2\pi^{3/2}r} \sum_i A_i \left\{ e^{-\left(\frac{r-R_i}{\beta}\right)^2} \left[\frac{r+R_i}{\beta^3} - \frac{R_i}{\beta\gamma^2} \right] + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\beta}\right)^2} \left[\frac{r-R_i}{\beta^3} + \frac{R_i}{\beta\gamma^2} \right] \right\} \quad (3.63)$$

con $\beta = \sqrt{\gamma^2 - \alpha^2}$. Come verrà mostrato in seguito in scala logaritmica la parametrizzazione finale ottenuta deconvolvendo la densità di carica si discosta dalla densità di carica soprattutto per grandi r .

CAPITOLO 4

RISULTATI

In questo capitolo vengono presentati i risultati prodotti dall'applicazione dell'algoritmo. Vengono subito elencate brevemente alcune caratteristiche comuni a tutti gli esiti, di modo da poter inserire la presente trattazione in una cornice generale che sia la medesima per i vari nuclei esaminati:

1. Poiché, come descritto e mostrato nel precedente capitolo alla figura 3.3, il risultato del processo conferma la propria indipendenza dal potenziale iniziale scelto per avviare l'algoritmo (dal momento che l'algoritmo è autoconsistente) si è in generale scelto di partire dal potenziale di Woods-Saxon (inclusivo di termine spin-orbita) in cui, per semplicità, la componente Coulombiana è data dal potenziale di una sfera uniformemente carica avente raggio R_U (vedi equazione 3.47 [14]).
2. A parte per lo speciale caso del ^{208}Pb , si ricordi che i dati relativi alle densità di neutroni non sono reperibili: si è pertanto ipotizzato che esse corrispondano a quelle protoniche. I potenziali per i neutroni, pertanto, sono stati ottenuti mediante il medesimo target della controparte protonica. Questa ipotesi, inoltre, limita lo studio dei potenziali per i neutroni ai soli nuclei con $N = Z$ (fatta eccezione per il ^{208}Pb).

3. È riguardoso sottolineare che in nessun caso si è mai imposto nessun andamento asintotico né per le autofunzioni né per le densità teoriche: esse dovrebbero essere già prodotte con i relativi e corretti andamenti asintotici dall'algoritmo di risoluzione dell'equazione di Schrödinger.
4. Per quanto riguarda i dati provenienti da simulazioni quantum Monte-Carlo non si è utilizzata nessuna parametrizzazione, le densità sono state usate così come fornite.
5. La precisione richiesta per la convergenza dell'algoritmo è dell'1%. Questo criterio si concilia con osservazione che le densità empiriche presentano esse stesse un margine d'errore paragonabile: non ha senso stabilire delle condizioni di convergenza più stringenti su tale densità. In questo modo l'algoritmo non aggiunge ulteriori incertezze a quelle già presenti per le densità di riferimento. Per gli errori relativi alle densità usate si veda la tabella 4.1: per i dati sperimentali essi sono comprensivi dell'errore statistico e sistematico.

Tabella 4.1 – Errori per le densità usate

	SOG	Monte Carlo
^{16}O	$\sim 1\%$ [23, 24]	$\sim 7\%$ [16]
^{40}Ca	$\sim 1\%$ [25]	$\sim 10\%$ [26]
^{208}Pb p	$\sim 1\%$ [27]	
^{208}Pb n	$\sim 10\%$ [20]	

4.1 Potenziali centrali

Riportiamo separatamente i risultati relativi all'applicazione dell'algoritmo a densità sperimentali e densità da simulazioni quantum Monte Carlo, seguiti da un confronto fra i due casi e da alcune considerazioni sul termine Coulombiano del potenziale.

4.1.1 Densità sperimentali

L'applicazione dell'algoritmo a delle densità sperimentali risulta, nei risultati prodotti, molto variegata. In figura 4.1 sono riportati i risultati ottenuti per un nucleo di ^{16}O parametrizzato SOG o Fermi: poiché le parametrizzazioni non si discostano fra loro in maniera eccessiva i potenziali che ne derivano presentano andamenti molto simili. Lo stesso vale per il caso del ^{40}Ca , riportato in figura 4.2. Come specificato in precedenza i dati in questione derivano da esperimenti di scattering elettronico e forniscono, quindi, informazioni in merito ai soli protoni. Per i neutroni si è assunto che la densità fosse la stessa, dal momento che stiamo trattando nuclei con egual numero di protoni e neutroni. Questa trattazione, pertanto, non costituisce che un'approssimazione per quanto riguarda i potenziali di neutrone.

I risultati relativi al ^{208}Pb sono, se vogliamo, i più variegati: essi infatti possono fare affidamento su dati sperimentali relativi sia alle densità di protoni sia alla densità di neutroni, grazie ad un esperimento di scattering adronico [20]. I dati relativi ai neutroni, inoltre, presentano anche informazioni precise relativamente alle incertezze sulla densità. In figura 4.3 sono riportati i potenziali di protone e neutrone, in figura 4.4 il potenziale di neutrone confrontato con i potenziali ottenuti applicando il procedimento anche alle densità che rappresentano il margine d'errore sulle densità sperimentali. Ragionevolmente il potenziale esatto si deve trovare all'interno dell'area tratteggiata. In questa stessa figura, inoltre, sono raffigurati i potenziali di neutrone derivanti da altre metodologie, di modo da contestualizzare il risultato di questo lavoro: in particolare sono rappresentati anche un potenziale di Woods-Saxon con una parametrizzazione sulle energie sperimentali [12] e un potenziale derivante da metodologie di tipo Hartree-Fock con interazione di Skyrme SkI [28].

I risultati relativi al nucleo ^{208}Pb risultano particolarmente apprezzabili. Infatti, nonostante lo sforzo computazionale richiesto per un nucleo pesante sia notevolmente superiore ai nuclei precedenti, l'abbondanza di dati sperimentali, ed in particolare la possibilità di avere una densità di neutroni propriamente detta, consente di applicare l'algoritmo nelle proprie condizioni ottimali. Inoltre possiamo fare alcune ipotesi sui motivi fisici dell'efficacia dell'algoritmo applicato al ^{208}Pb : essendo un nucleo pesante si presta in modo particolare all'applicazione

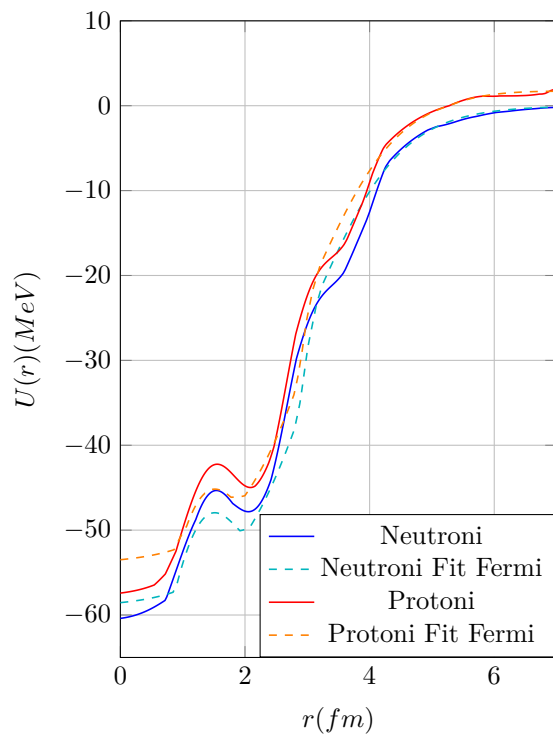
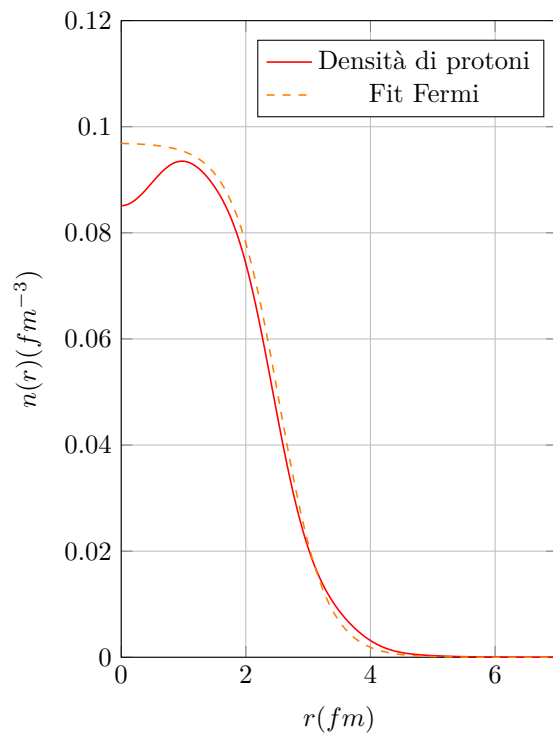


Figura 4.1 – ^{16}O SOG e Fermi

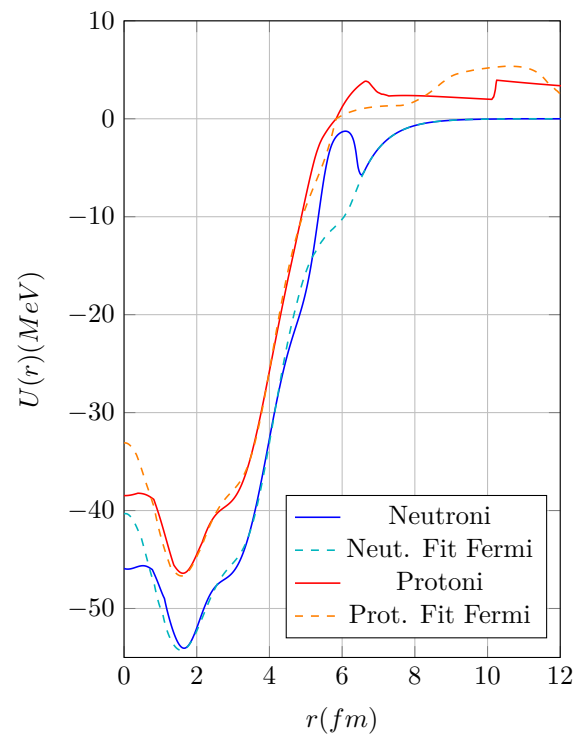
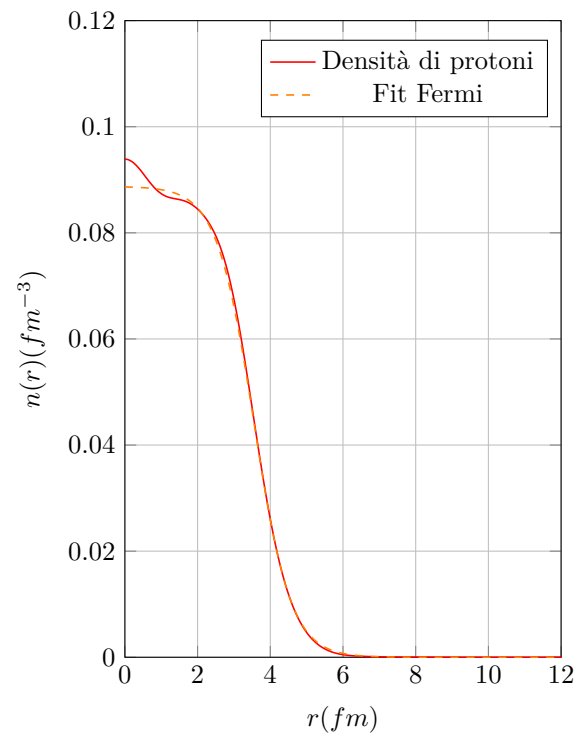
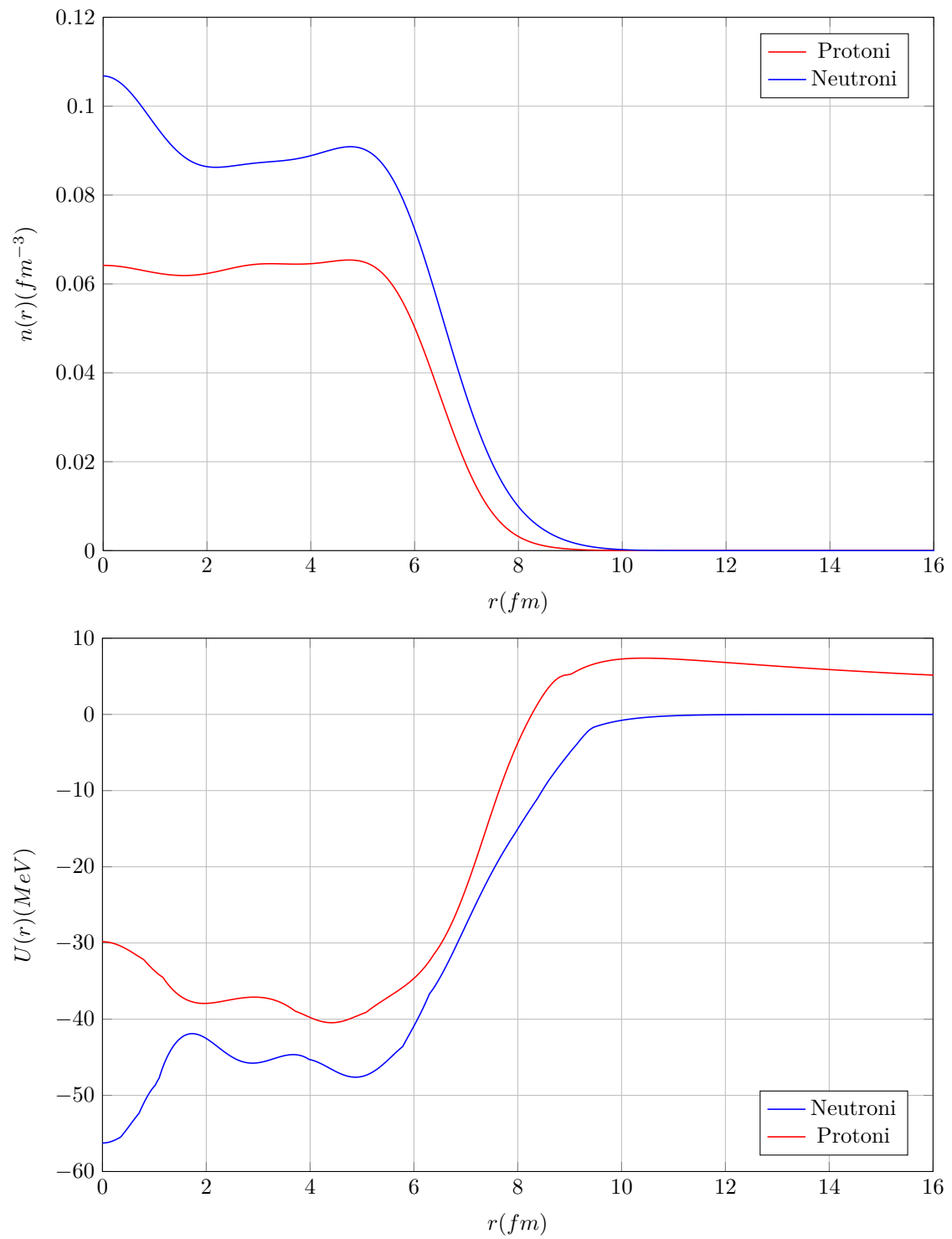


Figura 4.2 – ^{40}Ca SOG e Fermi

**Figura 4.3** – Densità e potenziali per il ^{208}Pb

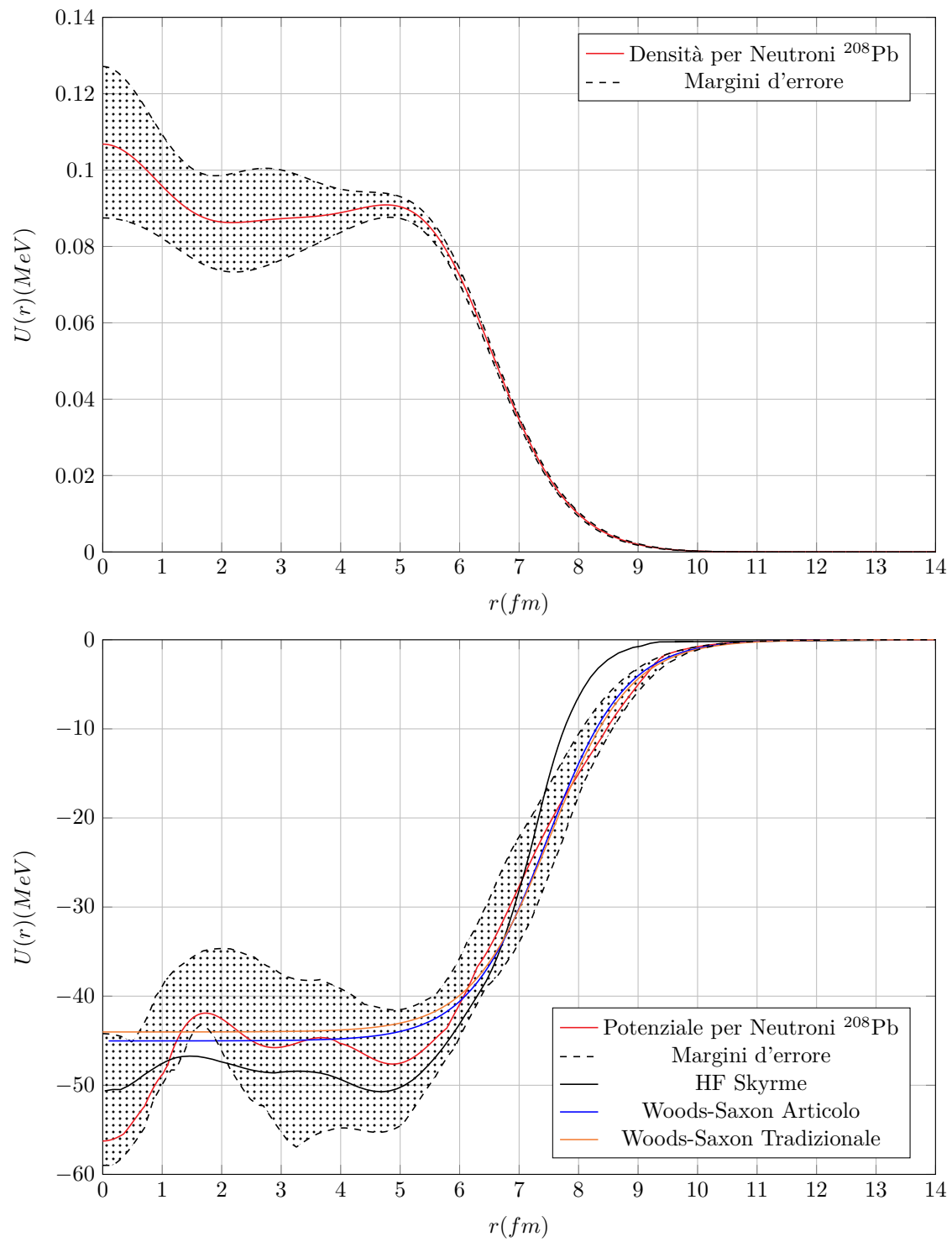


Figura 4.4 – Densità e potenziali con relativi margini d'errore per neutroni ^{208}Pb

di metodi di campo medio e, dato l'elevato numero di orbitali che concorrono alla determinazione delle densità può adattarsi in maniera più omogenea alla densità target.

Andamenti asintotici delle code

I risultati derivanti dall'applicazione dell'algoritmo a delle densità parametrizzate mediante somme di gaussiane e successivamente deconvolute per individuare correttamente la densità di probabilità in luogo di quella di carica presentano andamenti confrontabili con i risultati ottenuti con altri metodi (ad esempio Hartree-Fock). Gli andamenti sulle code, tuttavia, risultano a volte particolarmente irregolari (come è evidente nel caso del ^{40}Ca , figura 4.2), ad indicare dei problemi di tipo numerico/computazionale in queste regioni. Queste problematiche sono, a mio avviso, da ricondursi alla parametrizzazione delle densità.

Precedentemente (sezione 3.4.1), infatti, avevamo mostrato come le autofunzioni del potenziale nucleare in approssimazione di campo medio risultino molto ben descritte da delle autofunzioni di oscillatore armonico. Seguiva quindi naturalmente la scelta di parametrizzare la densità mediante funzioni gaussiane, secondo l'equazione 3.56. Nel processo di deconvoluzione, tuttavia, la forma funzionale della parametrizzazione si discosta da quella originale, come osservabile dall'equazione 3.63: è mantenuto l'andamento gaussiano nella regione interna e in quella superficiale, ma al di fuori dal nucleo le densità risultano sopresse in maniera eccessiva e lo scarto numerico che divide densità di carica e di probabilità si spinge fino ai quattro ordini di grandezza. Questo fatto ha origine dai diversi fattori che compaiono a esponente nelle equazioni 3.56 e 3.63, in particolare poiché si ha $\beta < \gamma$. Questa diversità è ben visibile in figura 4.5, dove le densità di carica e di probabilità sono riportate in scala logaritmica.

Gli ottimi andamenti asintotici ottenuti per i neutroni del ^{208}Pb , inoltre, permettono di confermare quanto già affermato: la densità di neutroni è parametrizzata direttamente mediante somma di gaussiane, laddove le densità di protoni, invece, necessitano una deconvoluzione. Sarebbe pertanto auspicabile che l'andamento asintotico tipico della SOG venisse mantenuto anche per le densità di probabilità dei protoni, nonostante la deconvoluzione. Per procedere in questa

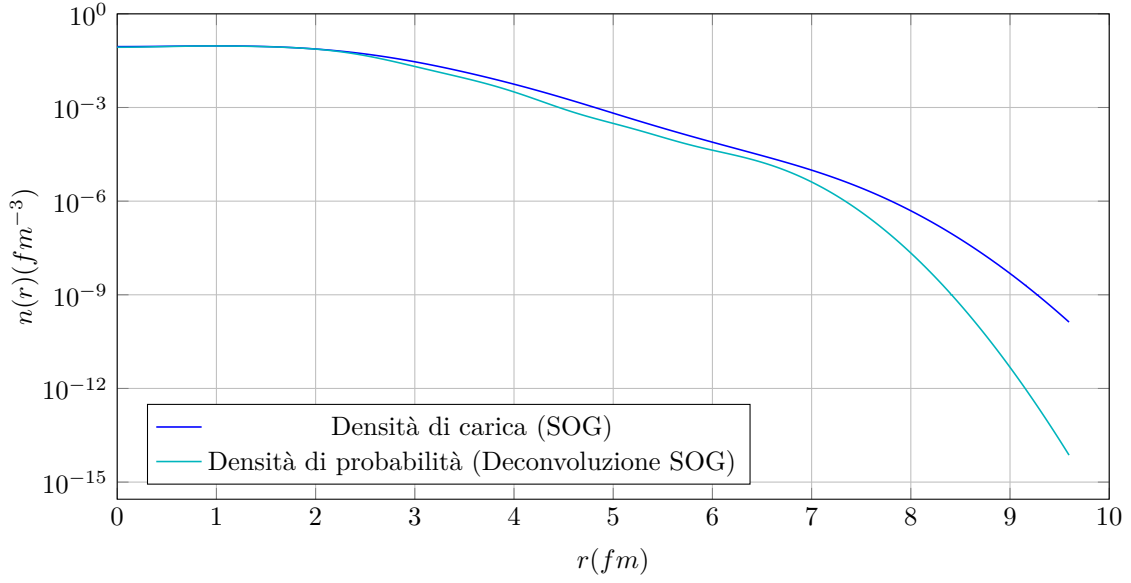


Figura 4.5 – Densità di carica e di probabilità in scala logaritmica per il ^{16}O

direzione sarebbe di conseguenza opportuno riparametrizzare nuovamente le densità di probabilità ottenute mediante somma di gaussiane. Per effettuare questa operazione ci si è serviti del software ROOT. Come funzione di parametrizzazione ho fatto ricorso ad una somma di 12 gaussiane, esattamente come nell'articolo di De Vries, centrate sui raggi R_i su cui già erano centrate per la parametrizzazione fornita dall'articolo. Il programma restituisce una funzione che presenta l'andamento di quella di partenza nella regione nucleare, mentre corregge, come desiderato, l'ordine di grandezza nelle code. L'uso della nuova densità porta a risultati significativi nel caso del ^{40}Ca : mentre in precedenza lo squilibrio numerico fra densità teoriche (confrontabili con quelle ottenibili da un oscillatore armonico, quindi gaussiane) e quelle empiriche portava a degli andamenti anomali nelle code (come l'insorgenza di valli indesiderate per i neutroni e code frammentarie per i protoni, osservabili in figura 4.2) ora tali problemi sono effettivamente assenti, come visibile in figura 4.6: nella parte (a) sono riportati i risultati relativi alla densità ottenuta mediante deconvoluzione della parametrizzazione SOG, mentre nella parte (b) tale deconvoluzione è stata nuovamente parametrizzata ancora tramite somma di gaussiane per ripristinare il corretto andamento nelle code.

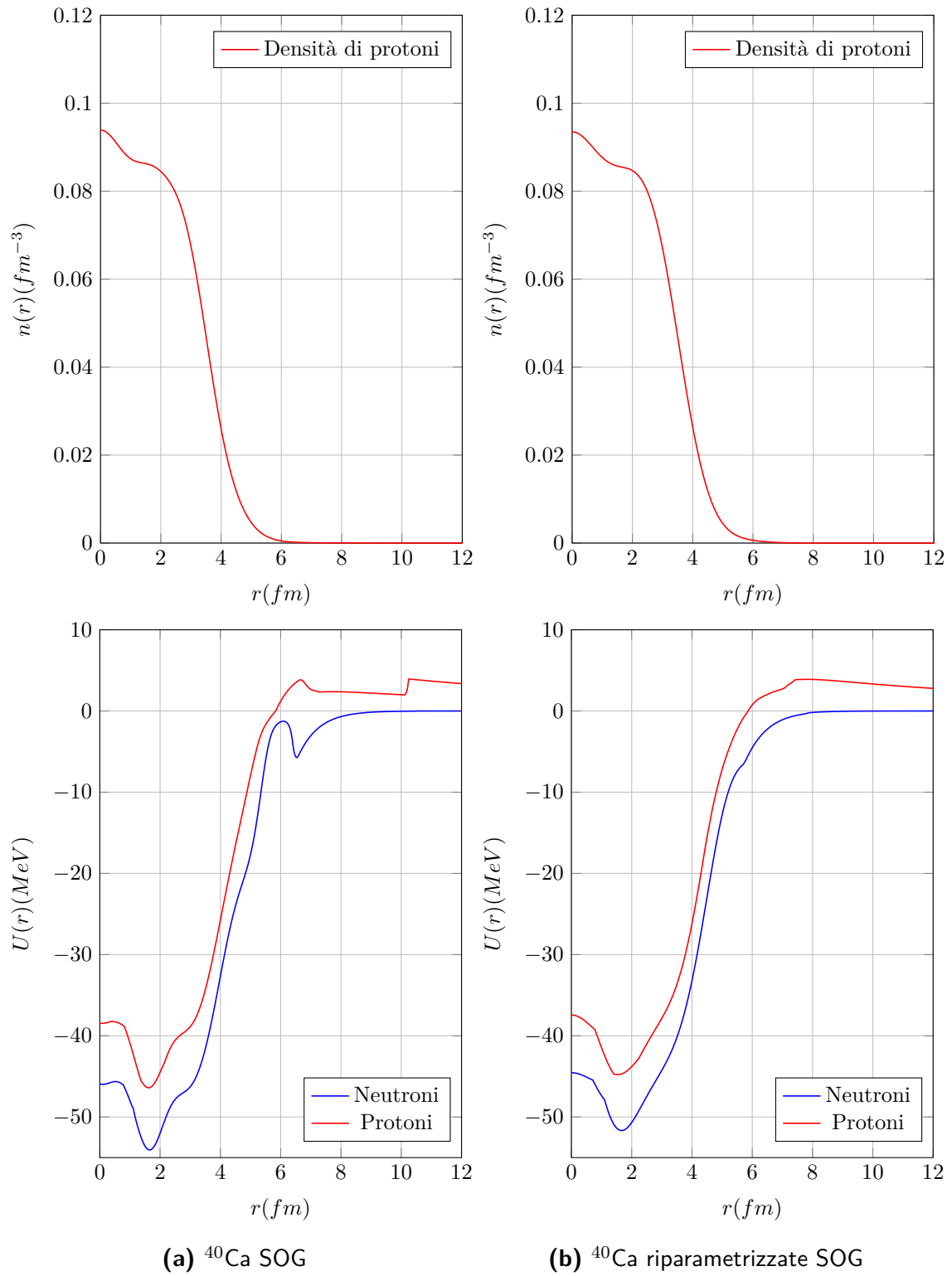


Figura 4.6

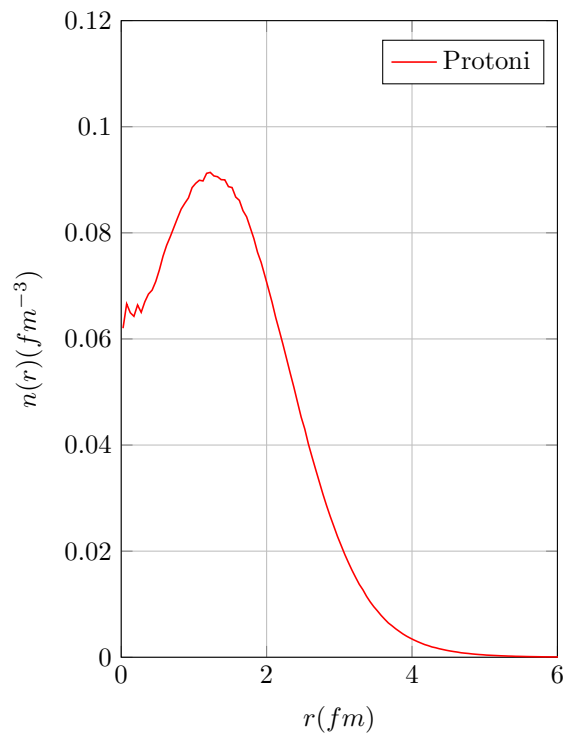
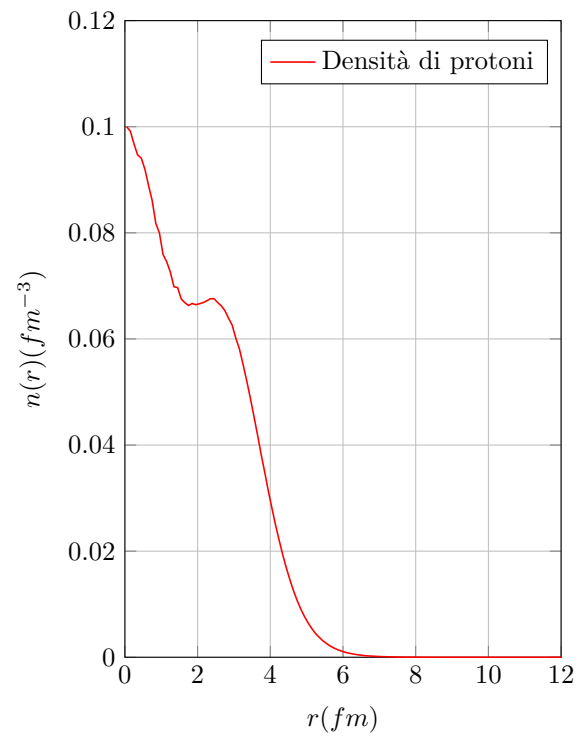
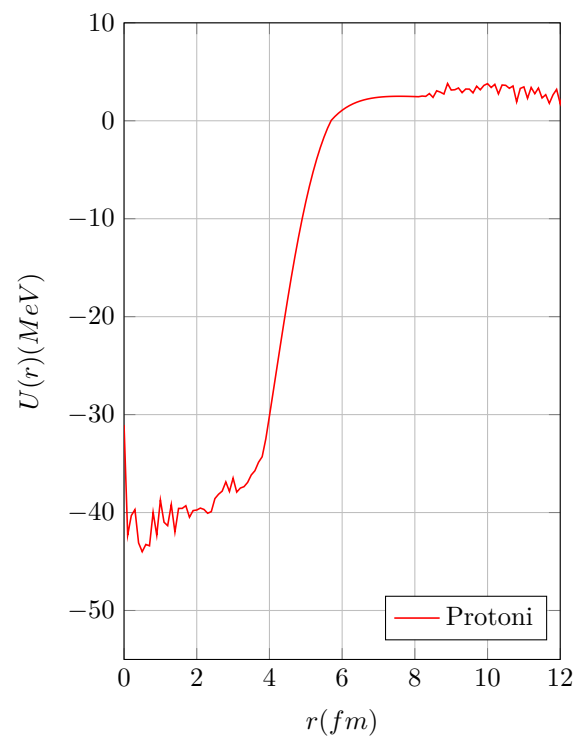
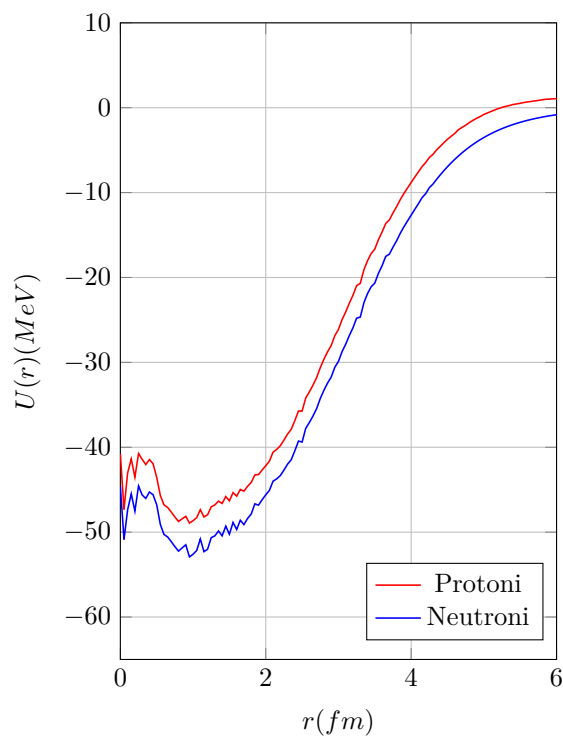
4.1.2 Simulazioni quantum Monte Carlo

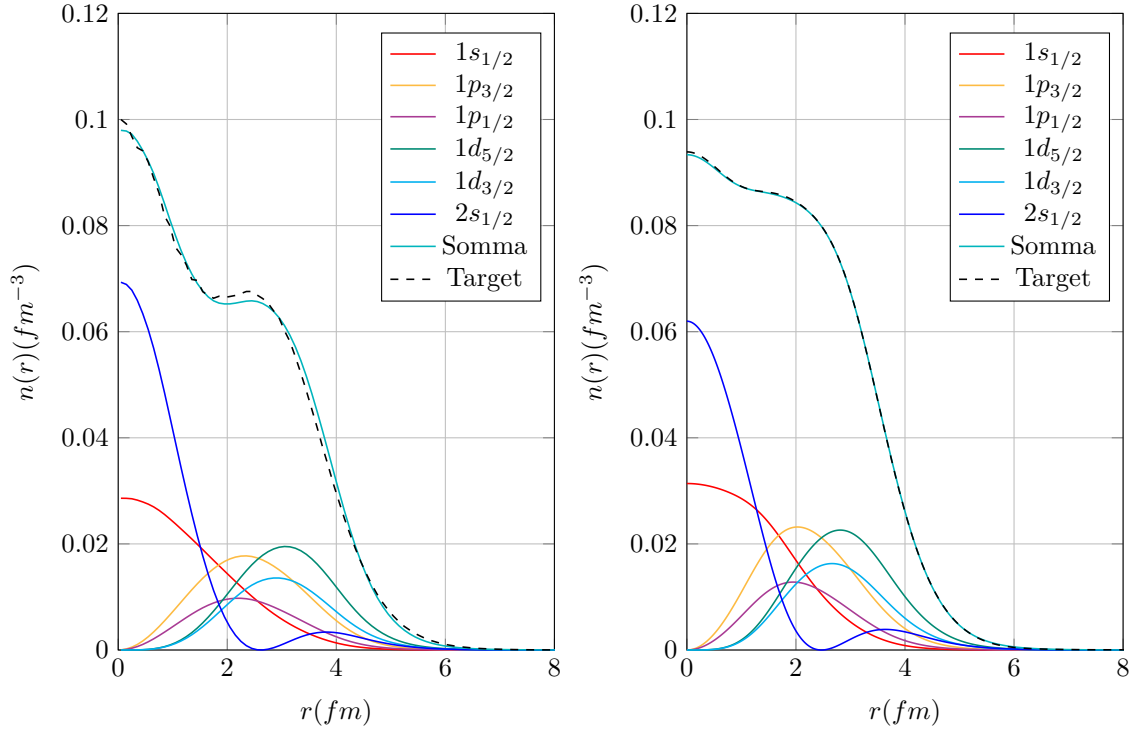
Se andiamo ad osservare i risultati relativi alle densità ottenute mediante simulazioni Monte Carlo per l' ^{16}O [16] in figura 4.7 riscontriamo un andamento significativamente diverso dai precedenti (figura 4.1): esso è privo di oscillazioni e presenta delle spigolosità dovute ad una densità target molto diversa da quella di partenza (la densità iniziale è molto diversa da quella finale, il punto di partenza dell'algoritmo è ben lontano da quello di arrivo). Nel caso del ^{40}Ca tali effetti sono ulteriormente amplificati (figura 4.8): i dati relativi alla densità provengono da simulazioni Monte Carlo ad opera del gruppo di Argonne [17]. Ancora una volta la densità è molto diversa per forma dalle precedenti (figura 4.2) ed il potenziale appare caratterizzato da piccole oscillazioni non fisiche. Va osservato che i metodi Monte Carlo risultano consolidati solo per nuclei di piccole dimensioni; per i nuclei di ^{16}O e ^{40}Ca l'applicazione è da contestualizzare all'interno di una fase esplorativa [18].

4.1.3 Confronto fra i due casi

Sia per quanto riguarda l' ^{16}O sia per il ^{40}Ca le densità, così come i potenziali che ne derivano, sono molto diversi a seconda che ricorriamo ai dati sperimentali [19] o alle densità teoriche da simulazioni Monte Carlo [18, 16]. A titolo esemplificativo riportiamo i risultati in merito ad un confronto più dettagliato per il ^{40}Ca : in particolare osserviamo come differiscano le autofunzioni per i due potenziali finali ottenuti da dati sperimentali e simulazioni Monte Carlo. In figura 4.9 sono raffigurate le densità nei due casi e il modulo quadro delle relative, moltiplicate per le rispettive degenerazioni e divise per 4π , così da visualizzarle pesate per la propria importanza all'interno della densità complessiva (si ricordi l'equazione 3.15).

Come visibile in figura 4.9 la densità derivante da metodi Monte Carlo è difficilmente replicabile: essa è fortemente piccata verso l'origine e presenta un curioso andamento a gradini. Per riprodurla le autofunzioni risultano molto diverse dalle analoghe per una densità SOG: tutte, infatti, hanno perso di importanza nella regione prossima all'origine in favore dell'orbitale $2s_{1/2}$, che ha accresciuto ulteriormente la propria ampiezza in quest'area. Questo effetto è ancor più evidente

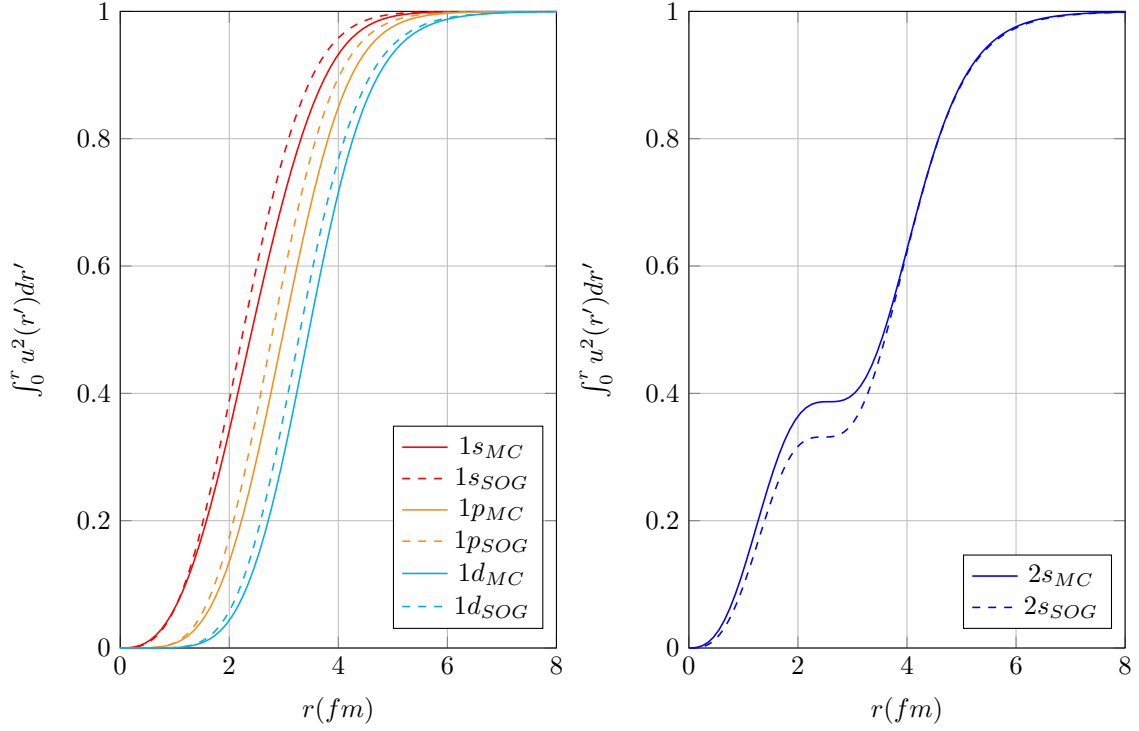
Figura 4.7 – ^{16}O Monte CarloFigura 4.8 – ^{40}Ca Monte Carlo



(a) ^{40}Ca : autofunzioni e densità Monte Carlo (b) ^{40}Ca : autofunzioni e densità SOG

Figura 4.9

in figura 4.10, in cui è riportato l'andamento dell'integrale $\int_0^r u^2(r')dr'$ al variare dell'estremo superiore di integrazione per gli orbitali nei due casi (si è trascurata la distinzione dovuta all'interazione spin-orbita): l'orbitale $2s$ è l'unico che cresce più velocemente nel caso Monte Carlo che nel caso SOG; per tutti gli altri orbitali avviene l'esatto contrario. Le densità tuttavia, anche se molto diverse, sono riprodotte in maniera assolutamente fedele dall'algoritmo, come si osserva dalla buona sovrapposizione fra la somma dei contributi delle varie autofunzioni e le densità target dell'algoritmo. Questa è un'ulteriore conferma dell'efficacia e del funzionamento del codice, nonché della sua versatilità. Per verificare la plausibilità dei risultati un criterio fondamentale è, in ogni caso, il confronto delle autoenergie relative ai potenziali ottenuti con i valori sperimentali. I dati sperimentali per le energie di particella singola sono stati presi da [12]: ad esse sono confrontati gli autovalori dei potenziali prima e dopo l'applicazione dell'algoritmo e in funzione della densità target scelta come riferimento (o della parametrizzazione usata per



(a) ^{40}Ca : andamento di $\int_0^r u^2(r')dr'$ nei due casi a confronto per $n = 1$ (b) ^{40}Ca : andamento di $\int_0^r u^2(r')dr'$ nei due casi a confronto per $n = 2$

Figura 4.10

rappresentarla). Il confronto è riportato in appendice A.

4.1.4 Termine Coulombiano

I risultati per l' ^{16}O permettono di documentare un fatto in precedenza solo accennato, ovvero quanto sia realistico il termine Coulombiano nell'approssimazione proposta da Slater [15] (indipendentemente dall'autoconsistenza del codice). In figura 4.11 sono infatti riportati in uno stesso grafico il potenziale ottenuto per i neutroni e il potenziale di protone dopo la sottrazione del termine Coulombiano così come formulato da Slater: la sovrapposizione fra i due grafici è molto buona. Complessivamente l'algoritmo porta a due potenziali distinti per protoni e neutroni, naturalmente, i quali differiscono prevalentemente per la presenza di un termine Coulombiano, che è descritto dalla differenza fra i due potenziali; se sottraendo

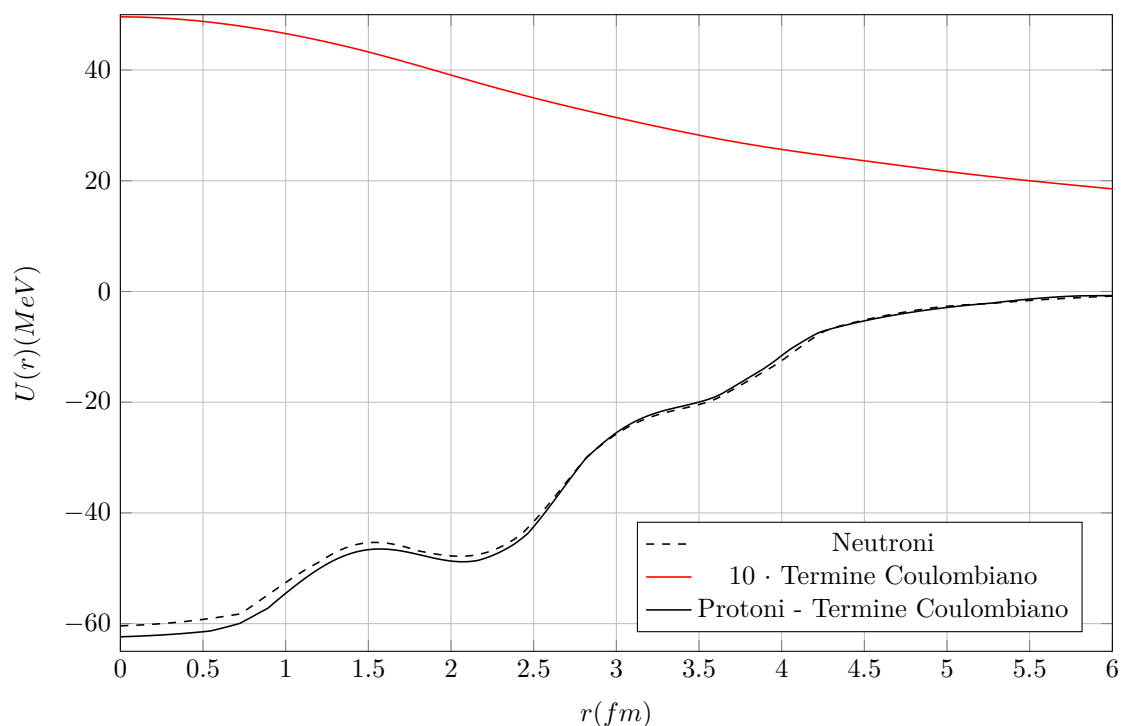


Figura 4.11 – Potenziale di neutrone e di protone privato del termine Coulombiano per ^{16}O

il termine indicato dal potenziale di protone ritroviamo il potenziale di neutrone significa che l'approssimazione utilizzata è una buona descrizione dell'interazione Coulombiana.

4.2 Potenziali di Spin

Per testare il modello proposto su potenziali *spin-dependent* occorre considerare nuclei dispari, in modo che esista effettivamente una disparità nel numero di nucleoni con spin up e spin down. Le densità di spin, tuttavia, non sono un'osservabile sperimentale ¹ e debbono, pertanto, essere calcolate tramite metodi teorici: in particolare, nel nostro caso, sono ottenute a partire da simulazioni Monte Carlo quantistiche, realizzabili solo per nuclei di piccole dimensioni. Una collezione di

¹Per misurare le densità di spin occorrerebbe condurre degli esperimenti di scattering in cui sia considerata anche la polarizzazione dei proiettili e del bersaglio prima e dopo lo scattering.

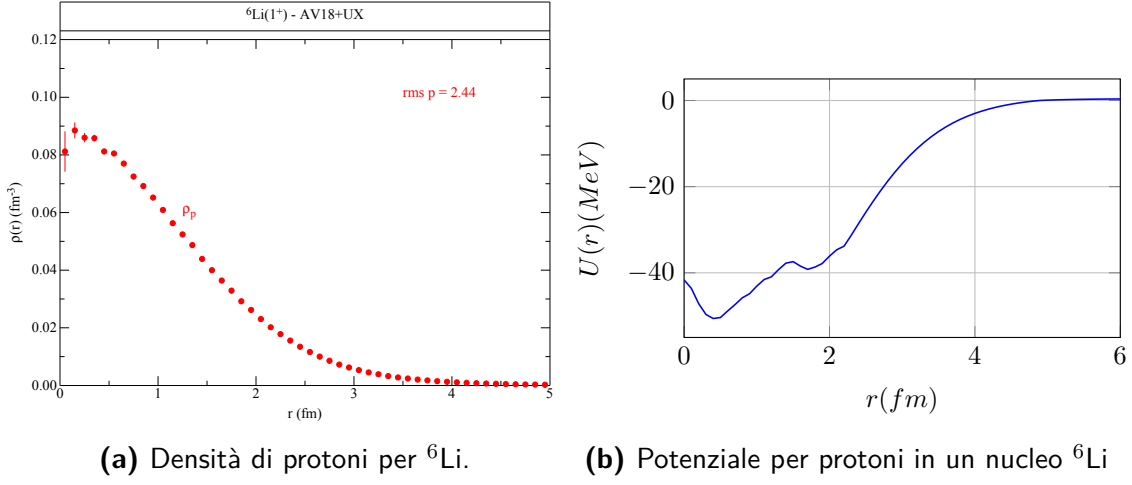


Figura 4.12

dati relativi ad alcuni nuclei leggeri è stata prodotta dalla sezione di fisica teorica dell' *Argonne National Laboratory* ed è reperibile alla pagina web [26].

Si è quindi scelto di testare il processo sul nucleo ${}^7\text{Li}$: questa scelta è dovuta alla presenza di un nucleo pari adiacente, il ${}^6\text{Li}$, per cui calcolare un primo potenziale dipendente, in questa approssimazione, dalla sola densità $n(r)$, dal momento che la densità di spin totale, da cui abbiamo assunto dipendere il termine Σ , è nulla. Il potenziale così ottenuto dal ${}^6\text{Li}$ e le relative autofunzioni sono quindi utilizzate come input per il processo sul ${}^7\text{Li}$. In questo modo stiamo assumendo che il potenziale *spin-independent* sia il medesimo per ${}^6\text{Li}$ e ${}^7\text{Li}$.

In figura 4.12a è riportata la densità di protoni per il ${}^6\text{Li}$ e in figura 4.12b il relativo potenziale.

Questo potenziale e le relative autofunzioni sono quindi stati presi come punto di partenza per l'applicazione al ${}^7\text{Li}$. Il processo è stato effettuato due volte, separatamente per protoni spin up e protoni spin down, come prevede l'algoritmo spiegato nella sezione teorica relativa (3.1.2). Sono stati quindi prodotti i potenziali $v_{\uparrow}(r)$ e $v_{\downarrow}(r)$ relativi alle densità $n_{\uparrow}(r)$ e $n_{\downarrow}(r)$. Ricordando le definizioni:

$$v_{\uparrow}(r) = v(r) + \Sigma_z(r) \quad (4.1a)$$

$$v_{\downarrow}(r) = v(r) - \Sigma_z(r) \quad (4.1b)$$

otteniamo tre modi differenti per ricavare $\Sigma_z(r)$:

$$\Sigma_z(r) = v_{\uparrow}(r) - v(r) \quad (4.2a)$$

$$\Sigma_z(r) = v(r) - v_{\downarrow}(r) \quad (4.2b)$$

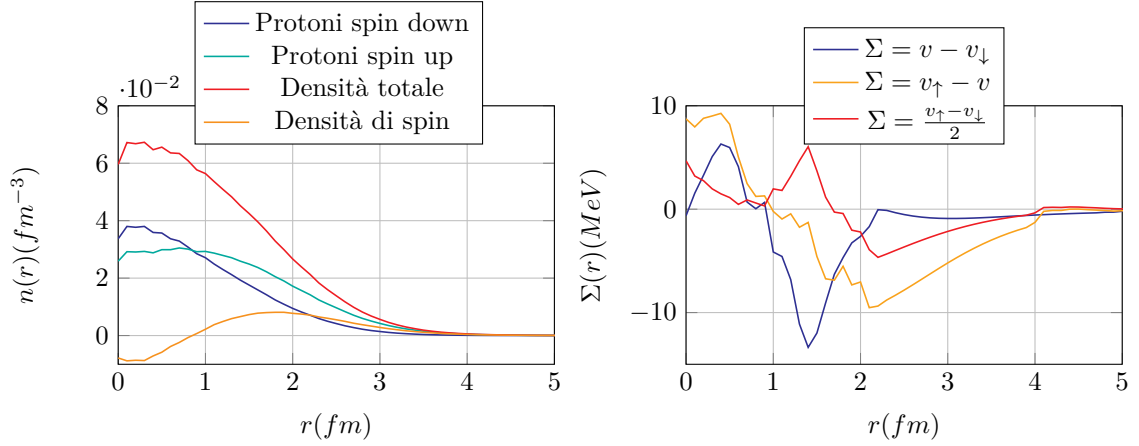
$$\Sigma_z(r) = \frac{v_{\uparrow}(r) - v_{\downarrow}(r)}{2} \quad (4.2c)$$

dove, in questa trattazione, si è considerato $v(r)$ come il potenziale ottenuto per il ${}^6\text{Li}$.

Riportiamo dapprima le densità di protoni spin up, spin down, complessiva e di spin in figura 4.13a.

Ogni nucleone, in generale, può avere probabilità non nulla di trovarsi sia in uno stato di spin up, sia in uno stato di spin down. Nella pittura a shell contemplata dal nostro modello, tuttavia, occorre assegnare ad ogni particella un orientamento di spin definito, così da poterne calcolare la funzione d'onda precisa. In questa rappresentazione si ha che per i tre protoni del ${}^7\text{Li}$, allo stato fondamentale, due di essi si trovano al livello $1s$ mentre il terzo risulta spaiato ed è sito sul livello $1p$. La scelta di orientarlo con lo spin verso l'alto è una pura convenzione e segue dal fatto che, integrando le densità di protoni spin up e spin down otteniamo valori prossimi a due per la prima e ad uno per la seconda (~ 1.93 e ~ 1.07 rispettivamente). Le densità ottenute mediante metodo Monte Carlo dal gruppo di Argonne non sono inserite nel contesto di un modello a shell né sono volte a tale rappresentazione, pertanto l'integrale delle densità può anche discostarsi da numeri interi.

Analogamente possiamo fare un discorso in merito alla densità di spin: se, come specificato in precedenza, essa risulta dalla semplice differenza fra densità di nucleoni spin up e spin down, in un'ottica puramente a shell ci aspetteremmo che tale densità corrispondesse, nel nostro caso, al modulo quadro della funzione d'onda dell'orbitale $1p$, in quanto è l'unico orbitale con un nucleone spaiato. In realtà la forma della densità di spin è dissimile da questa previsione: in una rappresentazione più realistica, infatti, non basta tener semplicisticamente conto del potenziale radiale attrattivo che agisce sui nucleoni ma occorre anche considerare la componente *spin-dependent* dell'interazione fra particelle. In altre parole nucleoni spin up e spin down risentono di due potenziali dalle forme differenti, che,



(a) Densità e densità di spin per protoni in un nucleo ${}^7\text{Li}$ (b) Potenziale di spin per protoni in un nucleo ${}^7\text{Li}$

Figura 4.13

pertanto, producono autofunzioni diverse da quelle originali e realizzano densità di spin differenti da $|\psi_{1p}|^2$.

Ricordiamo che in questa trattazione si è scelto di escludere il termine di interazione spin-orbita, poiché non risulta diagonale nella base $|l l_z s s_z\rangle$ in cui stiamo operando: questo termine, inoltre, non influisce significativamente sulle funzioni d'onda (e di conseguenza sulle densità e sulla forma del potenziale), come ben è evidente nella figura 3.1, ma solo sulle energie. Anche nello studio precedente del potenziale centrale, infatti, questo termine aveva il compito non tanto di migliorare ulteriormente la forma del potenziale efficace, quanto di consentire un paragone fra le autoenergie ottenute e quelle sperimentali, che sono classificate proprio in base al momento angolare totale dello stato in esame. L'aggiunta del termine spin-orbita risulterebbe, pertanto, un inutile appesantimento per la trattazione formale e per il calcolo numerico. In figura 4.13b sono riportati i risultati ottenuti nei tre differenti modi indicati nelle equazioni 4.2.

Come era immaginabile, mancando un risultato di riferimento, i potenziali ottenuti sono difficilmente interpretabili. Essi sono evidentemente affetti da grandi incertezze e il loro andamento è particolarmente spezzato: la causa principale è la piccola dimensione del nucleo in esame, tale da non consentire un'applicazione ottimale dell'approssimazione di campo medio in questo contesto. Inizialmente

si è ritenuto che le angolosità fossero riconducibili anche al passo di integrazione piuttosto ampio ($h = 0.1$ fm): tale ipotesi è stata smentita da due controprove. Provando infatti a realizzare dei fit sulle densità target, di modo da avere delle funzioni che le descrivessero e da poter usare passi piccoli a piacere, il risultato non è migliorato, il potenziale risultava comunque definito a tratti.

Testando inoltre l'efficacia dell'algoritmo su densità fittizie per un nucleo di ^{41}Ca con passo $h = 0.1$ fm si osservano due dati interessanti:

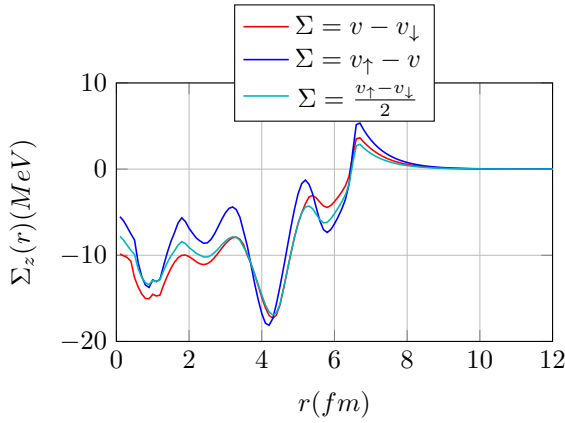


Figura 4.14 – Potenziali di Spin da densità fittizie per il ^{41}Ca nelle tre definizioni e con $h = 0.1$ fm

i potenziali di spin ottenuti risultano lisci nonostante il passo molto largo e sono pressoché identici indipendentemente dalla definizione di Σ utilizzata, come osservabile in figura 4.14. Il problema, pertanto, è presumibilmente di tipo numerico: in precedenza (vedi figura 3.3) avevamo mostrato come il risultato dell'algoritmo non dipendesse dal potenziale iniziale ma solo dalle densità target. Il potenziale iniziale, tuttavia, dovrebbe avvicinarsi a quanto ci aspettiamo di trovare per consentire un funziona-

mento ottimale dell'algoritmo (se il potenziale iniziale è eccessivamente dissimile il processo potrebbe faticare a raggiungere la convergenza). Nel caso del ^7Li immaginiamo che il potenziale di arrivo sia piuttosto diverso da quello di partenza, dal momento che la pittura di campo medio è meno efficace per i nuclei leggeri. È pertanto plausibile che, dal punto di vista strettamente numerico, il risultato non sia ottimale. In particolare il risultato ottenuto dalla definizione $\Sigma = \frac{v_\uparrow - v_\downarrow}{2}$ è evidentemente problematico poiché ottenuto mediante due processi distinti (uno per $v_\uparrow$ e uno per $v_\downarrow$), ognuno dei quali porta con sé gli errori numerici del proprio caso. Gli altri due grafici invece mostrano, se non altro, un andamento comune. Escludendo ulteriormente $\Sigma = v - v_\downarrow$ (poiché derivante da un processo in cui la densità $n_\downarrow(r)$ corrisponde, di fatto, ad una singola autofunzione: un solo protone

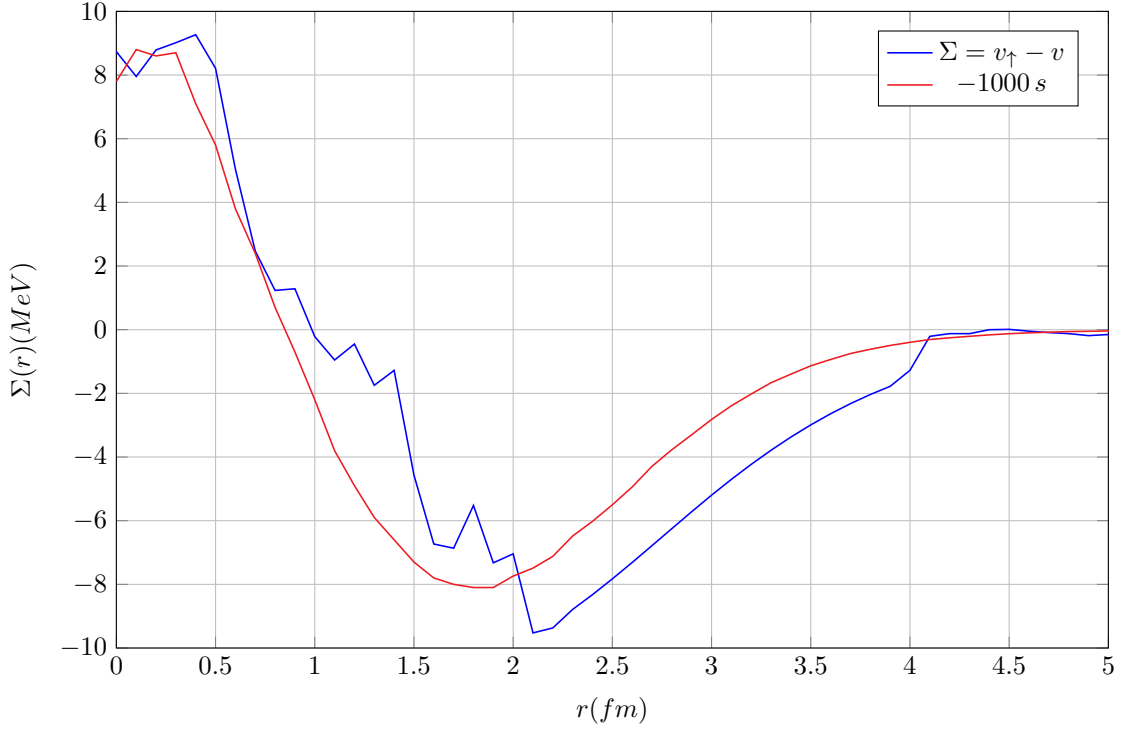


Figura 4.15 – $\Sigma = v_{\uparrow} - v$ confrontato con la densità di spin cambiata di segno e moltiplicata per un fattore 1000 per ${}^7\text{Li}$

ha, nel ${}^7\text{Li}$, spin down) soffermiamoci sull'andamento ottenuto per $\Sigma = v_{\uparrow} - v$: in figura 4.15 esso è riportato a confronto con la densità di spin cambiata di segno (moltiplicata di un fattore 1000 per rendere il paragone più efficace). L'andamento sembra in effetti suggerire una relazione di linearità tra Σ e la densità di spin: questa è anche prevista da quanto riportato nell'articolo [8], come mostrato in precedenza, per cui si arrivava a:

$$\Sigma_p = 2[(c_0 - c_1)\mathbf{s}_n + (c_0 + c_1)\mathbf{s}_p] \quad (4.3)$$

Dal momento che per il ${}^7\text{Li}$ $\mathbf{s}_n$ è nulla si arriva alla relazione di linearità sopra citata.

È interessante osservare che il risultato, ottenuto mediante il solo input numerico della densità di protoni con spin up, presenta una correlazione con la densità di spin complessiva, quindi comprensiva anche della densità di protoni con spin down, sebbene questo dato numerico non sia stato usato per produrre il poten-

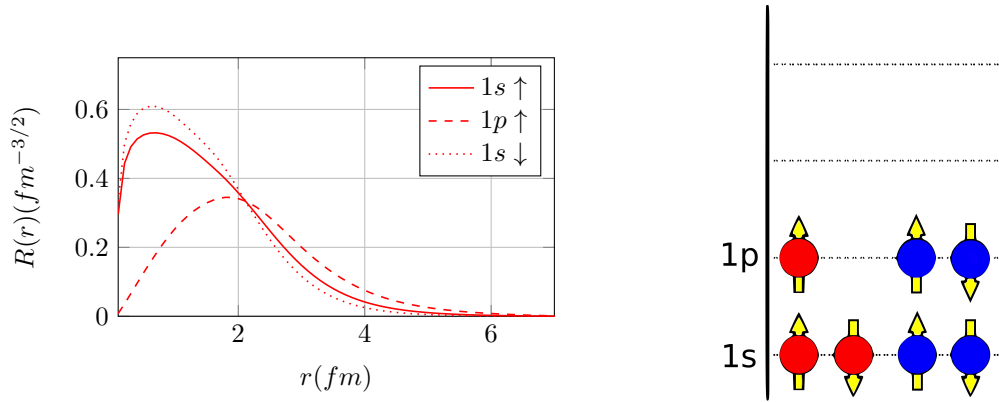


Figura 4.16 – Autofunzioni di particella singola per protoni in un nucleo di ${}^7\text{Li}$ e rappresentazione schematica della disposizione dei nucleoni nei vari stati nucleari.

ziale $\Sigma = v_{\uparrow} - v$: questo indica che il potenziale dipende in prima istanza dallo sbilanciamento fra stati di spin ed è una conferma dell'adeguato funzionamento dell'algoritmo e del codice. Realizzando inoltre un fit mediante software ROOT otteniamo che la costante c che meglio realizza la relazione di linearità $\Sigma_z(r) = c s(r)$ è

$$c = (-1015 \pm 47) \text{MeV fm}^3$$

Si osservi inoltre la scala sulla quale è riportato il grafico: l'effetto del potenziale di spin è dell'ordine della decina di MeV, tutt'altro che trascurabile soprattutto per nuclei della dimensione del ${}^7\text{Li}$. La correlazione lineare tra le due grandezze è inoltre interessante dal momento che lega due trattazioni ben distinte: la densità di spin, infatti, deriva da simulazioni Monte Carlo quantistiche [17], ma la relazione di linearità tra potenziale *spin-dependent* e densità di spin deriva da una trattazione di campo medio [8]. Qual è il significato fisico di un tale andamento per il potenziale di spin? Se consideriamo il potenziale come riportato in figura 4.15, ovvero il potenziale percepito da protoni spin up, esso è repulsivo in prossimità dell'origine e diventa attrattivo in corrispondenza degli orbitali dei protoni più esterni. Considerando che la densità di spin presenta lo stesso andamento ma con segno opposto il prodotto $\Sigma_z s_z$ risulta pressoché sempre negativo: questo implica che una maggiore concentrazione di stati spin down vicino all'origine e di spin up all'esterno realizza un contributo negativo all'energia di particella singola, minimizzando l'energia complessiva del sistema. Questo è compatibile con la rap-

presentazione che ci siamo dati per i protoni del ${}^7\text{Li}$: il protone spaiato nello stato $1p$, avente spin up, ha un orbitale localizzato lontano dall'origine; i due protoni nello stato $1s$, invece, hanno orbitali simili ma lievemente diversi: quello del protone con spin down, infatti, presenta probabilità maggiore (sebbene di poco) di trovarsi in corrispondenza dell'origine, in quanto vede un potenziale di segno opposto rispetto ai protoni spin up (quindi attrattivo nell'origine), compatibilmente con la densità di spin complessiva. La componente radiale delle funzioni d'onda di protone per il ${}^7\text{Li}$ e uno schema del nucleo sono riportati in figura 4.16.

What we call the beginning is often the end
And to make an end is to make a beginning.
The end is where we start from.

Little Gidding, T. S. Eliot

Giunti al termine di questo lavoro è opportuno riassumere in maniera sintetica i risultati ottenuti ed esprimere alcune osservazioni di carattere generale a riguardo. L'obiettivo principale di questo elaborato era ottenere dei potenziali per nuclei doppiamente magici a simmetria sferica attraverso la formulazione inversa della Teoria del Funzionale Densità nel formalismo di Kohn-Sham. Partendo da un metodo di inversione proposto da Van Leeuwen e Baerends [10], opportunamente adattato al caso nucleare, sono stati ottenuti i potenziali per alcuni nuclei rappresentativi di diverse regioni della carta dei nuclidi, come l' ^{16}O e il ^{40}Ca per nuclei medio-leggeri e il ^{208}Pb per i nuclei pesanti.

Il risultato principale da noi ottenuto è stato quello di verificare, per nuclei pesanti, che la procedura numerica è stabile. Per la prima volta abbiamo ottenuto un potenziale dai dati sperimentali che sia confrontabile con quelli riproducibili mediante metodi più tradizionali come Hartree-Fock con interazioni efficaci: in particolare i risultati migliori sono stati ottenuti per il ^{208}Pb , mentre per gli altri

nuclei si registra una notevole indipendenza dalla parametrizzazione dei dati sperimentali mediante funzioni specifiche, soprattutto riguardo le energie di particella singola.

Dall'applicazione dell'algoritmo a densità provenienti da simulazioni Monte Carlo si riscontrano alcune differenze rispetto al caso precedente: i potenziali da tali densità, infatti, si discostano notevolmente dagli analoghi sperimentali, così come, del resto, le densità stesse.

In un secondo momento si è tentata un'applicazione del codice a sistemi *spin-dependent*. La densità di spin, tuttavia, non è un'osservabile sperimentale e, pertanto, deve essere calcolata secondo metodi teorico-computazionali, come simulazioni quantum Monte Carlo. Queste sono applicabili, però, a soli nuclei leggeri, che, a causa della preponderanza degli effetti di superficie, si discostano molto dal caso di applicazione ottimale di questo schema teorico. Sebbene in un contesto puramente esplorativo, ad ogni modo, si è applicato il codice ad un nucleo leggero, il ${}^7\text{Li}$: i risultati ottenuti sono particolarmente interessanti. Si osserva, infatti, una correlazione lineare tra termine di potenziale *spin-dependent* e densità di spin.

La varietà dei risultati e dei casi considerati è una prova della versatilità dell'algoritmo, nonché dell'applicabilità del problema inverso della DFT in ambito nucleare e giustificano un interesse più approfondito verso questa tematica.

Sono pertanto auspicabili ulteriori sviluppi che possano seguire a questo lavoro di tesi, che è ben lungi dal dirsi concluso e apre anzi, a mio avviso, numerose possibilità: per quanto concerne l'aspetto più generale, inerente l'algoritmo e il codice utilizzato, un miglioramento globale della parte numerica costituisce certamente un primo passo, dal momento che il codice attuale rientra nell'ottica di una verifica dell'applicabilità stessa del processo al sistema nucleo in nostro interesse. L'interfacciamento dell'algoritmo di inversione con programmi già ottimizzati è pertanto un passo necessario. Riguardo al processo di inversione numerose alternative a quella utilizzata sono disponibili, alcune delle quali riportate in [9]: nuovi tentativi con metodi differenti possono essere effettuati per verificare se la scelta operata in questo lavoro per testare la fattibilità del problema sia migliorabile.

La componente *spin-dependent* del potenziale nucleare offre, inoltre, le maggiori possibilità di sviluppo: sarebbe interessante studiare nuclei più pesanti del

${}^7\text{Li}$, per i quali, del resto, diventa difficile reperire densità di spin ottenute per vie teoriche. I metodi Monte Carlo non possono spingersi verso nuclei eccessivamente pesanti a causa dell'elevato potere computazionale richiesto. Si potrebbero, tuttavia, esplorare i risultati derivanti da altre tecniche come *Coupled Cluster* e *No-Core Shell Model* [29, 30], i quali consentono di spingersi anche verso regioni della carta dei nuclidi non raggiungibili mediante metodi Monte Carlo. Per i nuclei leggeri, inoltre, si potrebbe pensare di includere anche dei termini dipendenti non solo dalla densità di spin ma anche dal suo gradiente, di modo da considerare più dettagliatamente effetti come quelli di superficie.

Un ulteriore passo potrebbe derivare dalla rinuncia alla richiesta di sfericità, di modo da includere anche nuclei deformati, e dallo studio di nuclei non doppiamente magici, così da osservare il contributo ed il comportamento degli effetti di *pairing*.

APPENDICE A

ENERGIE DI PARTICELLA SINGOLA

Le energie di particella singola costituiscono uno dei termini di paragone principali per verificare la coerenza del modello teorico proposto con il dato sperimentale. Inoltre permettono di individuare, a seconda dei casi, quale sia la parametrizzazione più opportuna per riprodurre l'andamento della densità nucleare. Il metodo utilizzato richiede, chiaramente, il calcolo di tutte le autofunzioni fino all'orbitale più esterno e, di conseguenza, delle relative autoenergie. Poiché, tuttavia, i dati sperimentali sono disponibili solo per le shell più esterne, il paragone può essere operato solo per tali livelli energetici. Questo fatto è dovuto alla modalità stessa con cui vengono estratte le energie: si tratta di esperimenti di spettroscopia volti a misurare le energie di eccitazione di nuclei vicini a quelli in esame. Tipicamente, infatti, sono le shell di valenza a determinare gli stati eccitati nucleari, poiché i nucleoni appartenenti a questi stati hanno minore energia di legame rispetto a quelli più interni. In generale in prossimità dei nuclei doppiamente magici, come quelli considerati, preso un nucleo ed un nucleone slegato da esso possiamo scrivere, per la conservazione dell'energia, le seguenti relazioni:

- $\epsilon(A, I^\pi) = \Delta M(A) - (\Delta M(A-1) + \Delta M(1)) - E(I^\pi)$ per reazioni del tipo

$${}^A_{Z-1}X + n \longrightarrow {}^A_Z X \quad \text{o} \quad {}^A_{Z-1}X + p \longrightarrow {}^A_Z X$$
- $\epsilon(A+1, I^\pi) = \Delta M(A+1) - (\Delta M(A) + \Delta M(1)) + E(I^\pi)$ per reazioni del tipo

$${}^A_{Z+1}X \longrightarrow {}^A_Z X + n \quad \text{o} \quad {}^A_{Z+1}X \longrightarrow {}^A_Z X + p$$

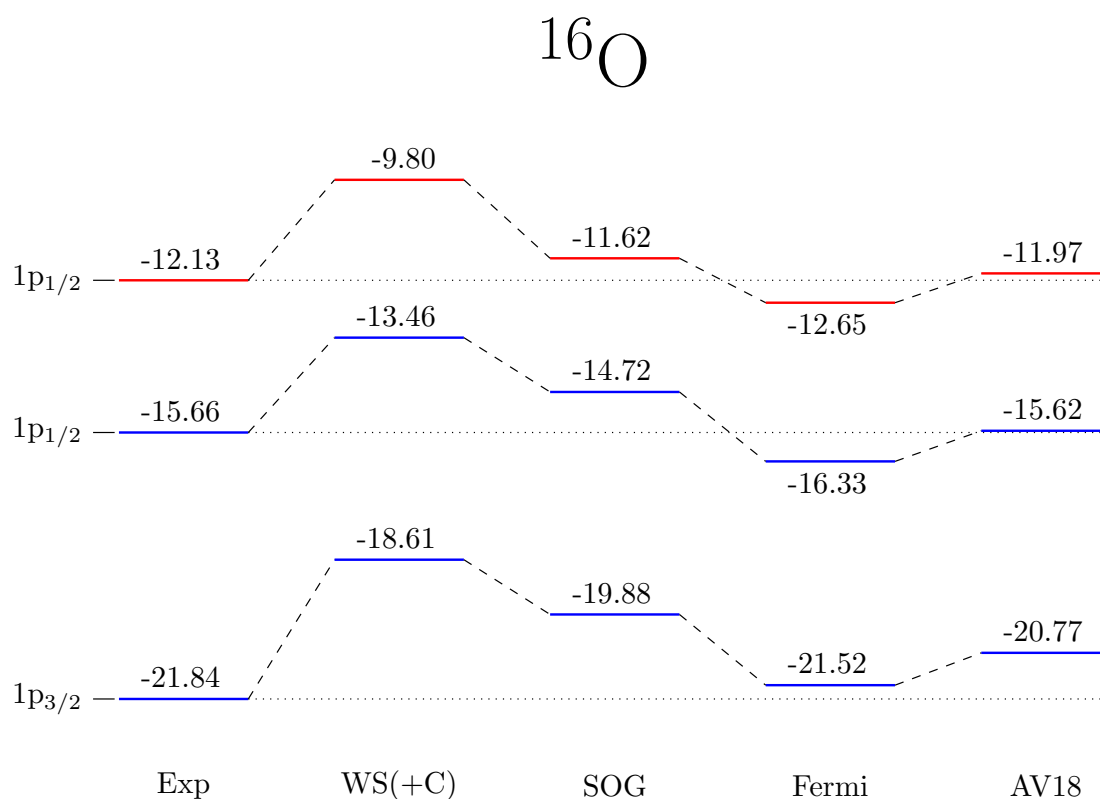


Figura A.1 – Energie di particella singola per un nucleo di ^{16}O (rosso protoni, blu neutroni): i risultati meglio in accordo con il dato sperimentale sono quelli ottenuti utilizzando direttamente le densità fornite dal metodo Monte Carlo, seguite da quelle relative a parametrizzazione con funzione di Fermi.

dove ϵ rappresenta l'energia di legame di particella singola, ΔM il difetto di massa e $E(I^\pi)$ l'energia di eccitazione di un dato stato.

Riportiamo pertanto di seguito le energie di singola particella per alcuni stati nucleari di cui fosse noto il paragone sperimentale. Il colore rosso è relativo ai protoni mentre il blu ai neutroni; il dato sperimentale è affiancato alle energie teoriche ottenute mediante potenziale di Woods-Saxon e ai potenziali ottenuti tramite densità parametrizzate SOG, Fermi o direttamente estratte da simulazioni Monte-Carlo.

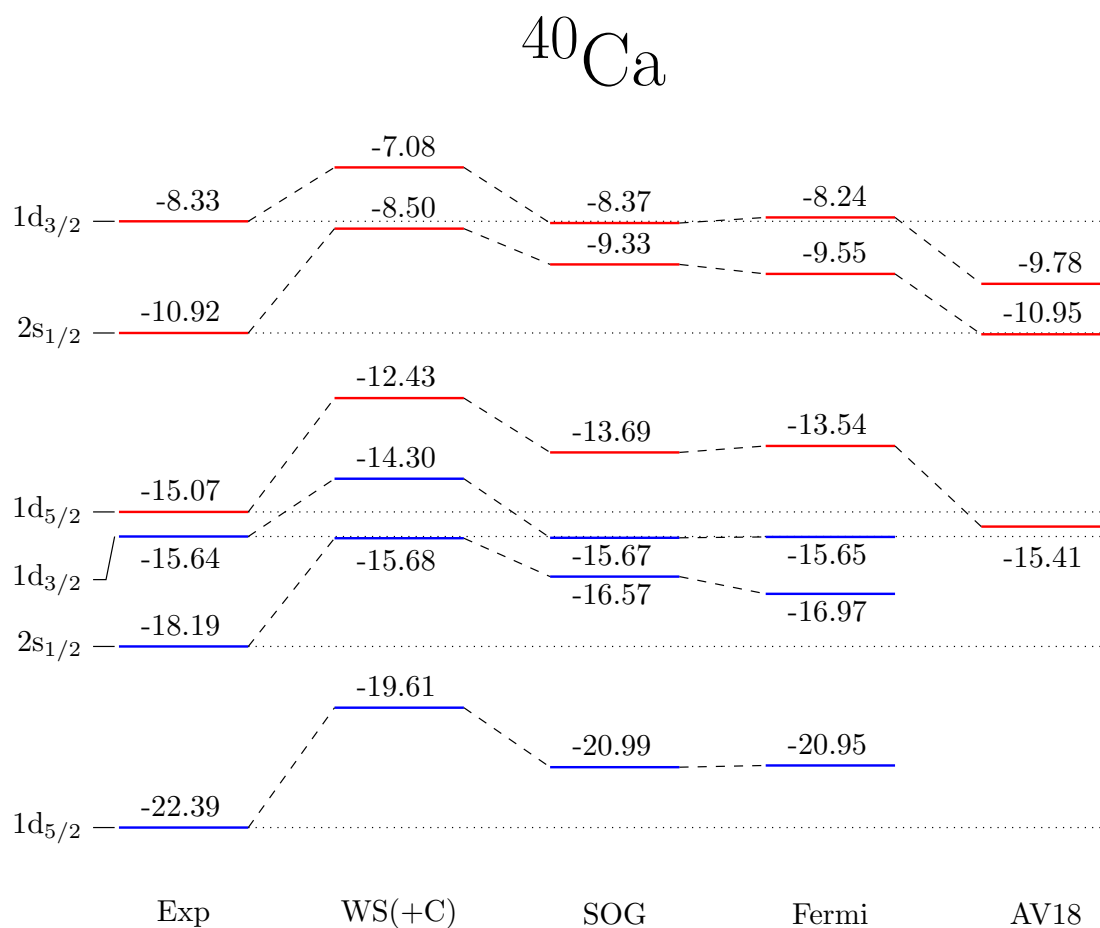


Figura A.2 – Energie di particella singola per un nucleo di ^{40}Ca (rosso protoni, blu neutroni): rispetto al caso dell' ^{16}O è interessante osservare come le autoenergie non dipendano significativamente dalla parametrizzazione scelta per le densità: non vi è differenza apprezzabile fra i risultati da fit SOG o con funzione di Fermi.

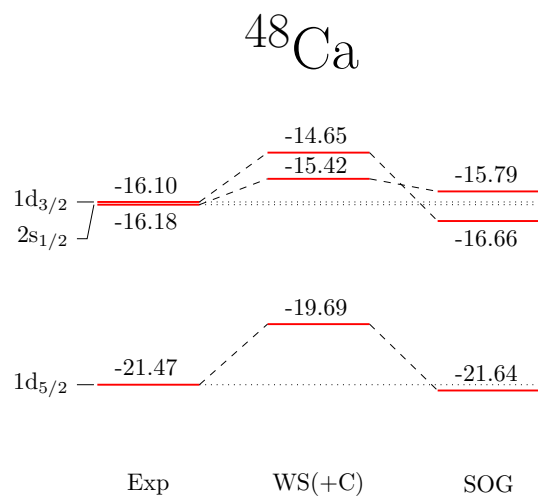


Figura A.3 – Energie di particella singola per protoni in un nucleo di ^{48}Ca : si osservi come le energie di protone sono molto più basse rispetto al ^{40}Ca a causa della maggiore intensità dell'interazione p-n.

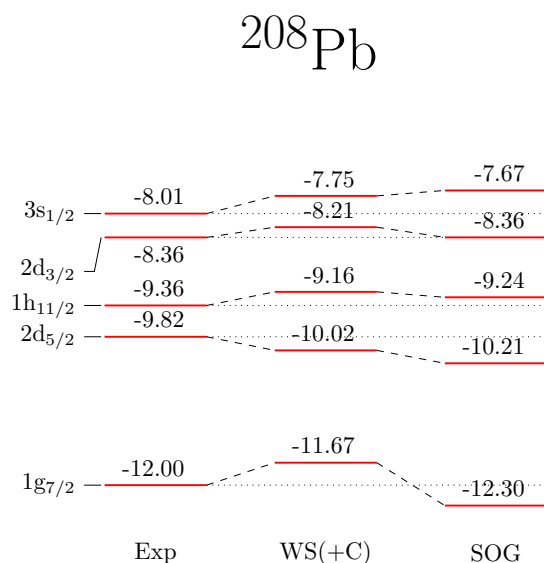
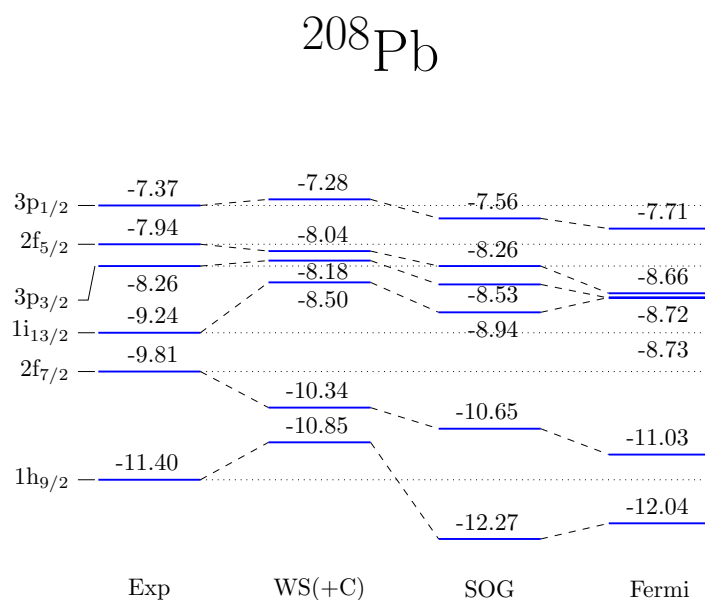


Figura A.4 – Energie di particella singola per protoni in un nucleo di ^{208}Pb

Figura A.5 – Energie di particella singola per neutroni in un nucleo di ^{208}Pb : si osservi in questa immagine e nella precedente come, a parte per alcuni livelli energetici, l'applicazione dell'algoritmo non comporti in questo caso un miglioramento delle energie già ottenute mediante potenziale di Woods-Saxon. Questo fatto è dovuto almeno in parte al fatto che il potenziale di Woods-Saxon aumenta la propria predittività per nuclei pesanti, più prossimi alla condizione di campo medio.



BIBLIOGRAFIA

- [1] Randolph Pohl, Aldo Antognini, François Nez, Fernando D. Amaro, François Biraben, João M. R. Cardoso, Daniel S. Covita, Andreas Dax, Satish Dhawan, Luis M. P. Fernandes, Adolf Giesen, Thomas Graf, Theodor W. Hänsch, Paul Indelicato, Lucile Julien, Cheng-Yang Kao, Paul Knowles, Eric-Olivier Le Bigot, Yi-Wei Liu, José A. M. Lopes, Livia Ludhova, Cristina M. B. Monteiro, Françoise Mulhauser, Tobias Nebel, Paul Rabinowitz, Joaquim M. F. dos Santos, Lukas A. Schaller, Karsten Schuhmann, Catherine Schwob, David Taqqu, João F. C. A. Veloso, and Franz Kottmann. The size of the proton. *Nature*, 466(7303):213–216, jul 2010.
- [2] Jouni Suhonen. *From Nucleons to Nucleus*. Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [3] Aage Bohr and Ben R. Mottelson. *Nuclear Structure*. World Scientific Pub Co Inc, 1997.
- [4] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, 136(3B):B864–B871, nov 1964.
- [5] W. Kohn and L. J. Sham. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, 140(4A):A1133–A1138, nov 1965.
- [6] J. Dobaczewski. Interactions, symmetry breaking, and effective fields from quarks to nuclei. (A primer in nuclear theory), 2003.

-
- [7] Y. M. Engel, D. M. Brink, K. Goeke, S. J. Krieger, and D. Vautherin. Time-dependent hartree-fock theory with Skyrme's interaction. *Nuclear Physics A*, 249:215–238, September 1975.
 - [8] J. Dobaczewski and J. Dudek. Time-odd components in the mean field of rotating superdeformed nuclei. *Physical Review C*, 52(4):1827–1839, oct 1995.
 - [9] Daniel S. Jensen and Adam Wasserman. Numerical methods for the inverse problem of density functional theory. *International Journal of Quantum Chemistry*, page e25425, jul 2017.
 - [10] R. van Leeuwen and E. J. Baerends. Exchange-correlation potential with correct asymptotic behavior. *Physical Review A*, 49(4):2421–2431, apr 1994.
 - [11] Christoph R. Jacob and Markus Reiher. Spin in density-functional theory. *International Journal of Quantum Chemistry*, 112(23):3661–3684, aug 2012.
 - [12] N. Schwierz, I. Wiedenhover, and A. Volya. Parameterization of the Woods-Saxon Potential for Shell-Model Calculations, 2007.
 - [13] B. Belgoumène, J. Dudek, and T. Werner. A new realisation of the realistic average field approach with density-dependent spin-orbit term. *Physics Letters B*, 267(4):431–437, sep 1991.
 - [14] Francesc Salvat, Aleksander Jablonski, and Cedric J. Powell. elsepa—Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules. *Computer Physics Communications*, 165(2):157–190, jan 2005.
 - [15] J. C. Slater. A simplification of the Hartree-Fock Method. *Physical Review*, 81(3):385–390, feb 1951.
 - [16] Stefano Gandolfi. Comunicazione privata.
 - [17] B. S. Pudliner, V. R. Pandharipande, J. Carlson, Steven C. Pieper, and R. B. Wiringa. Quantum Monte Carlo calculations of nuclei with $A < 7$. *Physical Review C*, 56(4):1720–1750, oct 1997.

- [18] J. Carlson, S. Gandolfi, F. Pederiva, Steven C. Pieper, R. Schiavilla, K.E. Schmidt, and R.B. Wiringa. Quantum Monte Carlo methods for nuclear physics. *Reviews of Modern Physics*, 87(3):1067–1118, sep 2015.
- [19] H. De Vries, C.W. De Jager, and C. De Vries. Nuclear charge-density-distribution parameters from elastic electron scattering. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 36(3):495–536, may 1987.
- [20] J. Zenihiro, H. Sakaguchi, T. Murakami, M. Yosoi, Y. Yasuda, S. Terashima, Y. Iwao, H. Takeda, M. Itoh, H. P. Yoshida, and M. Uchida. Neutron density distributions of Pb 204, 206, 208 deduced via proton elastic scattering at $E_p=295\text{MeV}$. *Physical Review C*, 82(4), oct 2010.
- [21] R. Anni, G. Co, and P. Pellegrino. Nuclear charge density distributions from elastic electron scattering data. *Nuclear Physics A*, 584(1):35–59, feb 1995.
- [22] I. Sick. Model-independent nuclear charge densities from elastic electron scattering. *Nuclear Physics A*, 218(3):509–541, jan 1974.
- [23] I. Sick and J.S. McCarthy. Elastic electron scattering from ^{12}C and ^{16}O . *Nuclear Physics A*, 150(3):631–654, jul 1970.
- [24] Wolfgang Schütz. Elastische Elektronenstreuung an ^{14}N , ^{15}N , ^{16}O und ^{18}O bei kleiner Impulsübertragung. *Zeitschrift für Physik A Atoms and Nuclei*, 273(1):69–75, mar 1975.
- [25] I. Sick, J.B. Bellicard, J.M. Cavedon, B. Frois, M. Huet, P. Leconte, P.X. Ho, and S. Platchkov. Charge density of ^{40}Ca . *Physics Letters B*, 88(3-4):245–248, dec 1979.
- [26] Single-nucleon densities, phy.anl.gov/theory/research/density/.
- [27] B. Frois, J. B. Bellicard, J. M. Cavedon, M. Huet, P. Leconte, P. Ludeau, A. Nakada, Phan Zuan Hô, and I. Sick. High-Momentum-Transfer Electron Scattering from Pb^{208} . *Physical Review Letters*, 38(4):152–155, jan 1977.
- [28] D. Vautherin and D. M. Brink. Hartree-Fock Calculations with Skyrme’s Interaction. I. Spherical Nuclei. *Physical Review C*, 5(3):626–647, mar 1972.

- [29] G Hagen, T Papenbrock, M Hjorth-Jensen, and D J Dean. Coupled-cluster computations of atomic nuclei. *Reports on Progress in Physics*, 77(9):096302, sep 2014.
- [30] Michael Karl Gerhard Kruse. The No Core Shell Model. In *Springer Theses*, pages 9–32. Springer International Publishing, 2013.