



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

FACOLTÀ DI SCIENZE E TECNOLOGIE

DIPARTIMENTO DI FISICA
CORSO DI LAUREA TRIENNALE IN FISICA

Da densità ab initio a potenziali efficaci nucleari

Relatore :

Prof. Gianluca Colò

Correlatori :

Prof. Xavier Roca Maza

Dott. Francesco Marino

Candidato:

IlariaLucia Cucchetti

Matricola n° 802733

A.A. 2019/2020

Indice

1	Fenomenologia della struttura nucleare e modelli teorici per sistemi a molti nucleoni	8
1.1	Introduzione	8
1.1.1	Osservabili nucleari	9
1.1.2	L'interazione nucleare	11
1.1.3	Lo stato dell'arte	12
2	Il problema diretto e inverso della DFT	16
2.1	La teoria del funzionale densità e le equazioni di Kohn-Sham	16
2.1.1	Introduzione	16
2.1.2	I teoremi di Hohenberg e Kohn	17
2.1.3	Equazioni di Kohn - Sham	17
2.1.4	Formulazione di Levy-Lieb	19
2.2	Problema inverso	20
2.2.1	Introduzione	20
2.2.2	I problemi inversi	20
2.2.3	Inversione delle equazioni di Kohn-Sham e metodo CV	21
3	Implementazione del metodo CV	23
3.1	Metodo CV per sistemi con simmetria sferica	23
3.1.1	Riscaldamento	25
3.1.2	Regolarizzazione	25
3.1.3	Riscrittura del problema	25
3.2	Implementazione numerica	26
3.2.1	IPOPT	26
3.2.2	Discretizzazione	27
3.2.3	Calcolo del potenziale	28
4	Risultati	29
4.1	QMC	31
4.1.1	^{40}Ca	31
4.1.2	^{90}Zr	41
4.2	SCGF	47
4.2.1	^{16}O	48
4.2.2	^{24}O	51
4.2.3	^{34}Si	54

4.2.4	^{40}Ca	58
4.2.5	^{48}Ca	61
4.2.6	Osservazioni	64
4.3	Confronti	65
A	Calcoli dettagliati	71
A.1	Funzionale obiettivo nelle variabili riscalate	71
A.1.1	Funzionale energia cinetica	71
A.1.2	Funzionale obiettivo	72
A.2	Derivate del funzionale obiettivo e dei vincoli	72
A.2.1	Gradiente della funzione obiettivo	73
A.2.2	Jacobiano dei vincoli	74
A.2.3	Hessiana	75

Elenco delle figure

1.1	Spettrometro di massa.	9
1.2	Esempi di densità. Fonte: https://inspirehep.net/literature/823384	11
1.3	Rappresentazione dei livelli energetici del modello nucleare a shell.	13
4.1	Potenziale di Woods-Saxon del ^{40}Ca	30
4.2	Potenziale relativo al nucleo ^{40}Ca per neutroni ottenuto con densità di tipo <i>Hartree-Fock SkX</i>	30
4.3	Potenziale relativo al nucleo ^{40}Ca per protoni ottenuto con densità di tipo <i>Hartree-Fock SkX</i>	31
4.4	Densità neutronica del nucleo ^{40}Ca . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	32
4.5	Ingrandimento dell'andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{40}Ca per $r \in [0; 5]$ fm.	33
4.6	Densità neutronica del nucleo ^{40}Ca ottenuta tramite <i>cubic smoothing spline</i> con parametro di smooth $p = 0.98$ a confronto con la densità di partenza. A sinistra, si ha la densità in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	34
4.7	Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{40}Ca ottenuta interpolando la densità QMC mediante il metodo <i>cubic smoothing spline</i>	35
4.8	Confronto densità neutronica del nucleo ^{40}Ca di partenza ed interpolata. A sinistra, si ha la densità in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	36
4.9	Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{40}Ca ottenuta dal fit.	36
4.10	Andamento della densità neutronica di ^{40}Ca dal metodo QMC a confronto con il suo errore puntuale percentuale.	37
4.11	Andamento, in scala logaritmica, del peso per l'interpolazione rappresentato come inverso dell'errore puntuale (blu), o del suo quadrato (rosso), della densità di partenza.	38
4.12	Confronto tra la densità neutronica del nucleo ^{40}Ca di partenza ed i due diversi fit. A sinistra, si ha la densità in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica	39
4.13	Confronto tra i potenziali relativi dalle densità neutroniche del nucleo ^{40}Ca ottenute dai due fit.	40
4.14	Confronto tra la densità neutronica del nucleo ^{90}Zr di partenza e quelle ottenute con i due diversi fit. A sinistra, si ha la densità in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	41
4.15	Andamento della densità neutronica di ^{90}Zr a confronto con l'errore puntuale percentuale.	42
4.16	Confronto tra i potenziali relativi al nucleo ^{90}Zr per le densità neutroniche ottenute dai due fit.	43

4.17	Confronto tra la densità protonica del nucleo ^{90}Zr di partenza con quelle ottenute dai due diversi fit. A sinistra, si ha la densità in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica	44
4.18	Andamento della densità protonica di ^{90}Zr a confronto con l'errore puntuale percentuale.	45
4.19	Confronto tra i potenziali relativi al nucleo ^{90}Zr per le densità protoniche ottenute dai due fit	45
4.20	Confronto tra i potenziali relativi al nucleo ^{90}Zr per la densità protonica (blu) e neutronica (rosso) nell'intervallo $r \in [0; 6]$	46
4.21	Densità neutronica del nucleo ^{16}O . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	48
4.22	Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{16}O	49
4.23	Densità protonica del nucleo ^{16}O . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	50
4.24	Andamento del potenziale per la densità protonica del nucleo ^{16}O	50
4.25	Densità neutronica del nucleo ^{24}O . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	51
4.26	Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{24}O	52
4.27	Densità protonica del nucleo ^{24}O . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	53
4.28	Andamento del potenziale per la densità protonica del nucleo ^{24}O	53
4.29	Densità neutronica del nucleo ^{34}Si . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	54
4.30	Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{34}Si	55
4.31	Densità protonica del nucleo ^{34}Si . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	56
4.32	Andamento del potenziale per la densità protonica del nucleo ^{34}Si	56
4.33	Densità neutronica del nucleo ^{40}Ca . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	58
4.34	Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{40}Ca	59
4.35	Densità protonica del nucleo ^{40}Ca . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	60
4.36	Andamento del potenziale per la densità protonica del nucleo ^{40}Ca	60
4.37	Densità neutronica del nucleo ^{48}Ca . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	61
4.38	Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{48}Ca	62
4.39	Densità protonica del nucleo ^{48}Ca . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.	63
4.40	Andamento del potenziale per la densità protonica del nucleo ^{48}Ca	63
4.41	Confronto densità $ADCM_{fit_b}$ e $NNLO_{sat}$	65
4.42	Potenziali ottenuti dalla densità $ADCM_{fit_b}$ e $NNLO_{sat}$	66
4.43	Differenza tra i potenziali relativi al nucleo ^{40}Ca per la densità neutronica ottenuti con il metodo CV relativi alla densità $ADCM_{fit_b}$ e $NNLO_{sat}$	66
4.44	Confronto potenziali relativi al nucleo ^{40}Ca per la densità neutronica ottenuti con le diverse densità e con i due metodi.	67

4.45	Differenza tra i potenziali relativi al nucleo ^{40}Ca per la densità neutronica ottenuti con i due metodi relativi alla densità $NNLO_{sat}$	67
4.46	Differenza tra i potenziali relativi al nucleo ^{40}Ca per la densità neutronica ottenuti con i due metodi relativi alla densità $ADCM_{fit_b}$	68

Introduzione

La fisica nucleare è molto complessa: esistono infatti molti nuclei, molte osservabili che includono proprietà dello stato fondamentale, spettroscopia degli stati eccitati, reazioni e decadimenti. Questa complessità non è descritta da un modello come quello standard. Uno dei problemi della fisica teorica nucleare ancora irrisolto risulta essere la determinazione di un potenziale efficace microscopico in grado di descrivere accuratamente l'interazione fra nucleoni all'interno dei nuclei e le loro proprietà. Questo è dovuto alla tuttora incompleta conoscenza dell'interazione nucleare efficace e al fatto che il nucleo sia un sistema fisico costituito da molti nucleoni che fa di esso un problema a molti corpi non risolubile esattamente.

Tra i vari modelli utilizzati per la descrizione del nucleo quelli di campo medio riescono a descrivere buona parte della complessità dei fenomeni. Essi si basano sull'ipotesi che ogni nucleone possa essere trattato come una particella indipendente soggetta a un potenziale efficace costituito dall'interazione con le altre particelle. La determinazione di un potenziale in grado di riprodurre i dati sperimentali relativi diventa quindi la chiave per la comprensione della struttura nucleare. Esistono molti esempi di potenziali efficaci ricavati dai dati sperimentali come: Skyrme, Gogny; si tratta di potenziali ottenuti mediante un procedimento di fit molto complesso che porta ad avere molti parametri. Nel presente lavoro ci si propone di percorrere una strada innovativa: ricavare un potenziale efficace, di particella singola, partendo da densità nucleari non sperimentali, bensì ricavate con metodi *ab initio*.

Nel contesto di questo lavoro vi è la teoria del funzionale densità (DFT) che stabilisce una corrispondenza biunivoca tra il potenziale e la densità dello stato fondamentale di un sistema fermionico. Il problema diretto (dato un potenziale ricavarne la densità) è largamente utilizzato in ambito della fisica elettronica e della fisica nucleare. Il problema inverso, quello che utilizzeremo, è invece ancora poco studiato. Svilupperemo il problema inverso mediante metodo variazionale: il potenziale risulta essere un moltiplicatore di Lagrange. Il metodo utilizzato è il *constrained variational* ed è stato sviluppato per sistemi con simmetria sferica, in modo da poterlo applicare ai nuclei magici.

Le densità utilizzate derivano da calcoli *ab initio*, ottenute tramite metodi Quantum Monte Carlo (QMC) e funzioni di Green auto-consistenti (SCGF). Si tratta, in linea di principio, di densità esatte derivanti da calcoli che partono dall'interazione tra nucleoni nel vuoto.

Il testo è strutturato in quattro capitoli: nel capitolo 1 verrà data un'immagine dello stato dell'arte, nel capitolo 2 si discuterà della DFT e del problema inverso, nel capitolo 3 si spiegherà in dettaglio il metodo utilizzato e la sua implementazione numerica e nel capitolo 4 si esporranno i risultati ottenuti con l'applicazione del metodo e infine seguiranno le considerazioni.

Capitolo 1

Fenomenologia della struttura nucleare e modelli teorici per sistemi a molti nucleoni

1.1 Introduzione

Per poter costruire un modello del nucleo nello stato fondamentale è necessario conoscere le sue proprietà generali come: massa, raggio, spin e momenti elettromagnetici. Tali osservabili possono essere ricavate mediante procedure sperimentali più o meno complesse e i risultati così ottenuti devono essere successivamente interpretati con la costruzione di una teoria.

È noto che i nuclei atomici sono formati da neutroni e protoni, chiamati nucleoni, e si potrebbe pensare di seguire il procedimento utilizzato in fisica atomica in cui, applicando la meccanica quantistica vengono risolti, in linea di principio, tutti i problemi. Per poter fare ciò è fondamentale poter conoscere la forza che si esercita tra i nucleoni e da questa dedurre successivamente le proprietà nucleari.

Al momento non è possibile seguire questo approccio per due motivazioni: in primo luogo il fatto che il sistema nucleare sia composto da molte particelle fa di esso un problema a molti corpi per cui non esiste soluzione esatta dell'equazione di Schrödinger. In secondo luogo tra i nucleoni non viene esercitata una forza "semplice" come quella di Coulomb ma una composta di termini a due e a tre corpi con una dipendenza complicata da posizione, momento e spin che ad oggi non è ancora nota con precisione.

Per ovviare al problema è necessario ricorrere all'introduzione di modelli che riproducano con precisione, più o meno accurata, il comportamento nucleare. Nell'utilizzare questo approccio non è possibile avere un unico modello in grado di descrivere tutte le proprietà del nucleo: i vari modelli utilizzati, dal più semplice al più complesso, rappresentano ognuno diverse caratteristiche fondamentali della fisica nucleare che seppur legate tra loro non possono ancora essere unificate in un'unica teoria.

Lo scopo del presente capitolo è quello di voler dare un'immagine, seppur sicuramente non esaustiva, dello stato dell'arte in fisica nucleare per poter poi spiegare e comprendere le motivazioni di questo elaborato.

1.1.1 Osservabili nucleari

La misura delle osservabili ha permesso di dedurre molte caratteristiche della struttura dei nuclei. Essi sono stati legati quantistici di particelle chiamate nucleoni, il cui numero totale viene indicato con A , e dei quali ne esistono due tipi: i protoni che hanno carica positiva, indicati con Z , e i neutroni, privi di carica, indicati con N .

In questo paragrafo ci limitiamo ad una breve discussione [22] delle grandezze di bulk come: densità, raggi, masse, energie di legame ed energie di separazione. Si tenga presente che queste non sono le uniche grandezze misurate ma ci sono anche energie, momenti di multipolo, spin, momenti magnetici di cui però non discuteremo poiché non sono oggetto di questa tesi.

Massa

La massa dei nuclei è determinata studiando la traiettoria di particelle cariche in campi elettrici e magnetici. Lo strumento adoperato per tale misura è lo spettrometro di massa, il cui principio di funzionamento è mostrato in figura 1.1, e che è in grado di selezionare ioni in carica q e velocità v e ne curva la traiettoria sfruttando campi elettrici e magnetici.

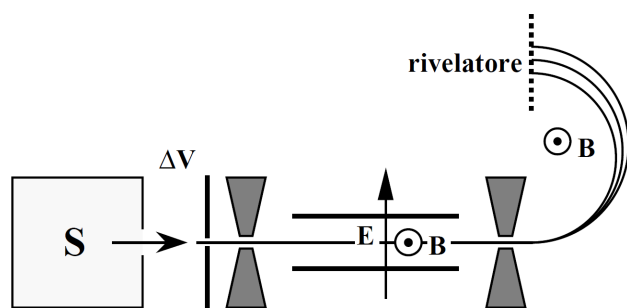


Figura 1.1: Spettrometro di massa.

Il raggio di curvatura R della semicirconferenza percorsa dalla particella dipende dal rapporto di carica e massa $\frac{q}{M}$ e dunque, nota q , è possibile estrarre il valore di M .

$$M = \frac{qBR}{v} \quad (1.1)$$

B è il valore del campo magnetico nella regione di spazio in cui la traiettoria delle particelle viene curvata.

Le masse nucleari sono misurate in termini di *unità di massa atomica*, u , definita in maniera

tale che la massa dell'atomo ^{12}C valga esattamente $12 u$. In fisica nucleare si preferisce lavorare con masse in unità di energia piuttosto che con le masse stesse. Il passaggio da massa ad energia è possibile basandosi sul risultato fondamentale dalla relatività speciale, $E = mc^2$, con un fattore di conversione

$$1 u = 931.502 \text{ MeV}$$

consentendoci di utilizzare liberamente masse o energie in base alle nostre esigenze.

Energia di legame

Un sistema legato si trova tipicamente a un livello di energia inferiore di quello dei suoi costituenti non legati, o in altri termini

$$M(A, Z) < Zm_p + (A - Z)m_n$$

Tale difetto prende il nome di energia di legame (*binding energy*), ed è l'energia necessaria scomporre il nucleo nei suoi costituenti

$$B.E.(A, Z) = M(A, Z) - Zm_p - (A - Z)m_n \quad (1.2)$$

Si osserva che il suo valore per nucleone, $B.E./A$, aumenta con A per nuclei leggeri e raggiunge il suo massimo attorno ad $A \approx 60$ per poi decrescere lentamente e si attesta approssimativamente

attorno a 8 MeV: questo comportamento suggerisce che un nucleone non interagisca con tutti gli altri ma solamente con quelli più vicini, cioè si abbia la presenza di un fenomeno di *saturazione* della forza nucleare.

Energie di separazione

L'energia di separazione è l'energia da fornire ad un nucleone per estrarlo dal nucleo

$$S_p = B.E.(A, Z) - B.E.(A - 1, Z - 1) \quad S_n = B.E.(A, Z) - B.E.(A - 1, Z) \quad (1.3)$$

Raggi

Il raggio quadratico medio di carica (rms), $R = \langle r^2 \rangle^{1/2}$, di un nucleo può essere misurato tramite metodi sperimentali di interazione elettromagnetica tra il nucleo e gli elettroni o i muoni. Esistono principalmente quattro metodi per le misurazioni: diffusione elastica degli elettroni, transizioni energetiche in atomi muonici, shift isotopico da raggi X K_{alpha} e shift isotopico ottico [12] di cui i primi tre sono stati impiegati solo per isotopi stabili. Tuttavia, l'ultimo è stato eseguito su nuclei lontani dalla stabilità, perché lo sviluppo nei metodi di spettroscopia ottica laser offre l'opportunità di effettuare misurazioni di atomi radioattivi con vite inferiori a 1 ms.

Le misurazioni delle transizioni negli atomi muonici e gli esperimenti di scattering di elettroni elastici forniscono informazioni sui raggi di carica, mentre i raggi X K_{alpha} e gli shift isotopici ottici forniscono informazioni sui loro variazioni isotopiche.

La prima misura del raggio del nucleo fu fatta da Rutherford e Chadwick utilizzando la diffusione di particelle α , formate da due protoni e due neutroni legati tra di loro. Il volume V di un nucleo è, in buona approssimazione, proporzionale al numero A di nucleoni dove ogni nucleone occupa un volume dell'ordine di $V_0 = 7.2 \text{ fm}^3$. Se si assume, in prima approssimazione, che il volume sia quello di una sfera allora un volume $V \approx AV_0$ implica un raggio

$$R = r_0 A^{\frac{1}{3}} \quad (1.4)$$

dove $r_0 \approx 1.2 \text{ fm}$. Assumendo valida tale approssimazione il volume per nucleone risulta essere $\frac{V}{A} \approx 4r_0^3$ con una distanza media di

$$4^{\frac{1}{3}} r_0 \approx 2 \text{ fm}. \quad (1.5)$$

Densità

Dallo studio dei dati empirici, provenienti prevalentemente da esperimenti di scattering elastico di elettroni [7], la densità risulta essere una quantità approssimativamente costante all'interno del nucleo, indipendentemente dallo stesso, e che decresce rapidamente a zero verso la superficie.

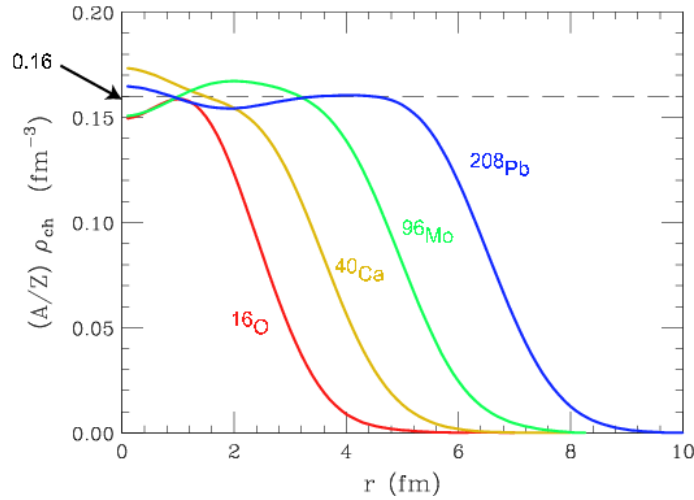


Figura 1.2: Esempi di densità. Fonte: <https://inspirehep.net/literature/823384>

Spesso la densità viene interpolata con una funzione di Fermi:

$$n(r) = \frac{n_0}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}} \quad (1.6)$$

dove a , che vale circa $0.5 - 0.6$ fm è il parametro di diffusività e descrive l'andamento della densità nei pressi della superficie mentre n_0 è la densità di saturazione e vale $0.16 - 0.17$ fm⁻³ [13].

1.1.2 L'interazione nucleare

I protoni e neutroni interagiscono tramite forza nucleare. Tale interazione è a corto raggio, si estende fino a circa 1.5 fm, ed ha un carattere prevalentemente attrattivo. Sebbene a brevissime distanze, circa 0.3 fm, l'interazione abbia una componente fortemente repulsiva questa non viene risentita dai nucleoni a causa della loro distanza media (1.5). Ha la caratteristica di essere charge independent, ovvero non dipende dalle cariche delle particelle coinvolte, e presenta una forte dipendenza dallo spin. La sua espressione analitica non si conosce con esattezza ma si fa uso di approssimazioni che comprendono un numero variabile di termini: centrale, spin-orbita, tensoriale. [13].

Nel corso degli anni sono stati effettuati diversi tentativi nella costruzione di un potenziale che meglio descrivesse l'interazione NN sulla base di esperimenti di scattering tra nucleoni. Un esempio è quello dell'interazione non relativistica di Argonne v_{18} [48], composta da un termine elettromagnetico, una parte relativa al contributo dallo scambio di un pione, particella mediatrice dell'interazione, ed un termine a breve range.

Oggi sappiamo che i nucleoni non sono particelle elementari ma composte, ovvero stati legati di quark e gluoni. Esistono dei primi tentativi nel cercare di derivare il potenziale che descrive l'interazione nucleone-nucleone dalla dinamica dei quark, ma che non hanno ancora raggiunto un livello di precisione ed accuratezza tali da poter essere considerati definitivi [11]. Tale dinamica, e non solo, viene studiata dalla cromodinamica quantistica (QCD), una teoria che è non perturbativa per la scala di basse energie tipiche della struttura nucleare, ma che corrisponde ad una fisica ad ordini di energia e momento molto più grandi rispetto a quella di nostro interesse.

1.1.3 Lo stato dell'arte

Lo studio di sistemi nucleari richiede quindi l'introduzione di modelli matematici che possono essere suddivisi principalmente in due categorie: macroscopici e microscopici.

All'interno della prima categoria rientra ad esempio il modello a goccia [22]. Si tratta di un modello molto semplice ma di grande rilievo che, mediante pochi parametri empirici, è in grado di spiegare l'andamento dell'energia di legame in funzione di A in formula semi-empirica che prende il nome di equazione di *Bethe-Weizsäcker*.

Nella seconda categoria ricadono invece modelli tipicamente più complessi che, attraverso la costruzione di un'Hamiltoniana, cercano di descrivere l'interazione nucleare e le proprietà dei singoli nuclei. Il primo tra questi è il modello a shell non interagente [35], la cui idea fondamentale è che i nucleoni all'interno del nucleo possano essere considerati come particelle indipendenti che si muovono su orbite di singola particella e che è usato come base per teorie a molti corpi più elaborate [32]. Questo porta a ipotizzare che ogni nucleone risenta di un potenziale che sia la media delle interazioni con tutti gli altri. Vi è un'evidenza sperimentale a supporto dell'esistenza di shell nucleari: sono stati osservati nuclei che presentano un'energia di legame relativamente alta. Questo avviene per particolari valori di N e Z che prendono il nome di *numeri magici* (2, 8, 20, 28, 50, 82, 126) ed è interessante osservare che l'approssimazione di geometria sferica, adottata in sezione 1.1.1 per la descrizione del raggio nucleare, è una caratteristica peculiare proprio di quei nuclei che presentano tali numeri. In questo modello si usa un potenziale a un corpo che descrive, in buona approssimazione, gli effetti della mutua interazione tra i nucleoni. L'interazione NN rientra in modo indiretto nel calcolo dal momento che dà origine al potenziale medio.

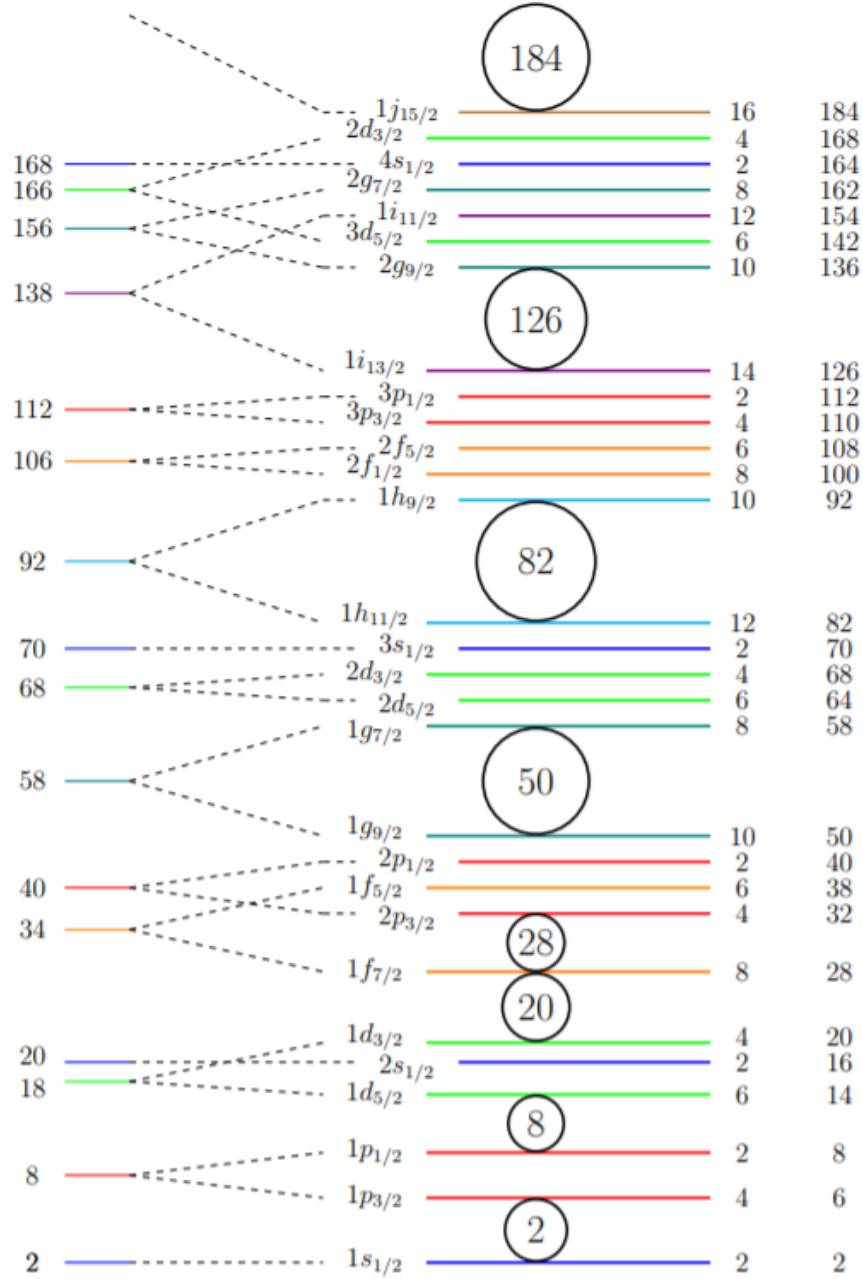


Figura 1.3: Rappresentazione dei livelli energetici del modello nucleare a shell.

Nel quadro dei modelli microscopici, il problema rimane quello di riuscire a determinare un potenziale medio a partire da un'interazione a due corpi. In questo senso trova un ruolo lo sviluppo di metodi auto-consistenti [4] nei quali il campo medio, ad esempio, viene determinato in maniera iterativa attraverso la risoluzione delle equazioni di Hartree-Fock. Uno dei principali ostacoli dell'applicazione diretta di tale metodo al caso nucleare con l'interazione NN nel vuoto è che, a causa della componente repulsiva a brava range del potenziale, si ottiene un contributo di energia infinito. Il successo di questi metodi deriva invece dall'introduzione di interazioni fenomenologiche come le forze di Gogny [8], di natura gaussiana, e le forze a range nullo e a tre corpi di Skyrme [43], le quali contengono termini proporzionali a delle δ di Dirac.

Un approccio diverso è quello dato dai metodi *ab initio*, il cui scopo principale è quello di risolvere l'equazione di Schrödinger per un sistema di particelle interagenti a partire da un'interazione di base nel vuoto tra i costituenti di un sistema [23, 17]. Si tratta di un obiettivo molto difficile da raggiungere e richiede metodi sia teorici che computazionali avanzati. Da un lato, la soluzione numerica diretta dell'equazione di Schrödinger non è possibile e sono richieste particolari tecniche e approssimazioni; dall'altro, gli studi della teoria nucleare sono resi ancora più difficili dalla struttura complicata della semplice interazione nucleare nel vuoto, proprio per il fatto che le forze nucleari non sono ancora state comprese nella loro interezza.

I primi metodi *ab initio* riscossero un successo limitato, mentre modelli fenomenologici, come appunto il modello a shell, portarono a grandi scoperte nella comprensione dei sistemi nucleari [35]. Questi metodi iniziano prendere piede proprio con l'introduzione di nuovi e sofisticati metodi a molti corpi, insieme alla crescita della potenza computazionale.

All'interno di questi metodi non vengono fatte assunzioni di campo medio ma si parte dalla costruzione di un'Hamiltoniana realistica che contenga termini di potenziali a due o tre corpi, vincolata nel riprodurre accuratamente le osservabili di sistemi a pochi corpi, come i dati di scattering nucleone-nucleone o le energie di legame dei nuclei di deuterio e trizio [48, 30]. Poi, l'equazione di Schrödinger per molti nucleoni è risolta numericamente con un appropriato metodo a molti corpi. Nel corso degli anni sono state sviluppate diverse tecniche: esempi ne sono Quantum Monte Carlo (QMC) [15, 29, 6], funzioni di Green autoconsistenti (SCGF) [3, 39], Coupled-cluster [16], Brückner-Hartree-Fock (BHF) [42], Fermi hypernetted chain/single-operator chain [36], teoria perturbativa a molti corpi (MBPT) [44, 9], come anche metodi utilizzabili solo per sistemi a pochi corpi, ad esempio il metodo delle armoniche ipersferiche [23].

Sebbene il problema di determinare l'interazione nucleare sia ancora aperto, esistono modelli realistici di forze a due e tre nucleoni. Insieme alle interazioni fenomenologiche [29, 48], in un certo modo ispirate da teorie di scambio di mesoni, hanno riscosso molto interesse anche i potenziali chirali [30, 11], che sono basati sulla descrizione a basse energie della Cromodinamica Quantistica (QCD) in termini di nucleoni e pioni, chiamata teoria chirale di campo efficace (EFT).

La teoria *ab initio* ha trovato larghe applicazioni nello studio di nuclei finiti [6], materia infinita [15, 39], stelle di neutroni [14, 26] e tassi di decadimento beta.

Le principali limitazioni sono legate al costo computazionale che ancora preclude lo studio di nuclei pesanti, come anche all'ancora non conclusa ricerca di un'interazione microscopica universalmente valida. Infatti, esistono diversi potenziali realistici, ma una singola interazione che, quando utilizzata in calcoli a molti corpi, permetta di descrivere sia nuclei finiti che la materia infinita non è ancora stata trovata [41]. Vi è anche il problema della dipendenza delle forze dai parametri legati alla regolarizzazione dei termini divergenti.

Per ultimo, un metodo microscopico che permette lo studio di sistemi fisici, senza la richiesta di specifici parametri di input adattati al caso specifico d'esame, è quello che prende il nome di teoria del funzionale densità, o DFT (Cap. 2). La teoria è basata sul fatto che il ground state di un sistema a molti corpi è caratterizzato completamente, sotto ipotesi piuttosto generali, dalla densità di singola particella. Il fatto che utilizzi una relazione biunivoca, garantita dai teoremi di Hohenberg e Kohn, tra potenziale e densità le permette di avere un carattere universale che non è presente in Hartree-Fock. Questo garantisce che è possibile determinare tutte le osservabili di bulk: la densità permette infatti di determinare la forma del sistema, i valori attesi degli

operatori a un corpo (quadrupolo elettrico, dipolo magnetico) e l'energia totale. Il vantaggio principale è che può essere applicata a molti nuclei ed essendo presente un legame con la materia infinita e quindi con la fisica di oggetti compatti può essere utilizzata anche per lo studio delle stelle di neutroni.

Lo scopo di questo lavoro è quello di indagare una strada molto innovativa che prevede di utilizzare degli input da modelli *ab initio*, nello specifico partendo da densità provenienti da metodi QMC con una determinata interazione, e costruire così un funzionale densità non empirico. Nel capitolo seguente verrà approfondita la tecnica iterativa utilizzata attraverso la quale si cerca di raggiungere questo obiettivo.

Capitolo 2

Il problema diretto e inverso della DFT

2.1 La teoria del funzionale densità e le equazioni di Kohn-Sham

2.1.1 Introduzione

Molti metodi efficaci per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger sono stati sviluppati per risolvere il problema a molti corpi. In fisica, per esempio, si ha la teoria perturbativa diagrammatica, basata sui diagrammi di Feynman e le funzioni di Green, o in chimica si ha il metodo di interazione di configurazioni (CI) [38], che sono basati su espansioni sistematiche del determinante di Slater. Il problema di questi metodi è l'enorme potenza computazionale che possono arrivare a richiedere: è semplicemente impossibile applicarli a sistemi grandi e complessi. Nessuno, difatti, ha mai calcolato la struttura elettronica di un vero semiconduttore mediante esclusivamente funzioni di Green [5]. È possibile fare una stima della complessità computazionale immaginando la rappresentazione dello stato Ψ su di una griglia in cui ogni coordinata è discretizzata in 20 punti. Per N elettroni, Ψ diventa una funzione di $3N$ coordinate e, dunque, sono richiesti 20^{3N} per descrivere Ψ su tale griglia. La densità è una funzione di tre coordinate e richiede 20^3 valori sulla stessa griglia. Per $N=10$ elettroni, la funzione d'onda a molti corpi richiede quindi $\sim 10^{35}$ volte più spazio di archiviazione della densità. Chiaramente, scelte intelligenti di simmetria possono semplificare il problema, ma la funzione d'onda a molti corpi completa rimane comunque inaccessibile per sistemi reali con più di pochi elettroni. In questo senso, la DFT (*Density Functional Theory*) che nasce a metà degli anni '60 del secolo scorso con i due teoremi di Hohenberg e Kohn fornisce una valida alternativa, magari meno accurata, ma molto più versatile. La DFT riconosce esplicitamente che sistemi Coulombiani non-relativistici differiscono tra di loro solo per il potenziale esterno $V(r)$, ed apre una via verso la trattazione degli operatori universali $\hat{T}$ e $\hat{U}$ in maniera definitiva.

Si tratta di una teoria quantistica che studia la struttura elettronica di un sistema a molti corpi, ma può essere applicata a sistemi costituiti da particelle fermioniche, come, ad esempio, il nucleo. L'idea alla base di tale teoria è quella di calcolare l'energia del sistema come funzionale della densità delle particelle, che risulta essere dipendente solo da tre incognite. Tale semplificazione permette di avere l'informazione in una sola funzione di tre variabili spaziali, invece che utilizzare una funzione d'onda di N particelle.

Si enunciano ora i due teoremi alla base della DFT facendo riferimento all'articolo [18].

2.1.2 I teoremi di Hohenberg e Kohn

Consideriamo un sistema quantistico a molti fermioni interagenti, soggetti a un potenziale esterno, governato dalla seguente Hamiltoniana

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N V(\mathbf{r}_{i,j}) + \sum_{i=1}^N V_{ext}(\mathbf{r}_i) = \hat{T} + \hat{W} + \hat{V} \quad (2.1)$$

dove T è l'energia cinetica del sistema, W è un potenziale a due corpi e V_{ext} un possibile potenziale esterno.

Definiamo la densità dello stato fondamentale come

$$n(\mathbf{r}) = N \int \Psi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N \quad (2.2)$$

Dall'equazione di Schrödinger è immediato notare che la densità dipende dal potenziale esterno cioè è un funzionale di V_{ext} .

Il primo teorema di Hohenberg e Kohn afferma che *la relazione che intercorre tra il potenziale esterno e la densità dello stato fondamentale è di tipo biunivoco, inoltre è sempre possibile esprimere in modo biunivoco la funzione d'onda dello stato fondamentale del sistema come funzionale della densità: $|\Psi\rangle = |\Psi[n(\mathbf{r})]\rangle$* .

Il secondo teorema segue direttamente dal primo e permette di stabilire il carattere variazionale del funzionale energia.

Essendo $|\Psi\rangle$ un funzionale della densità allora anche ogni altra grandezza fisica osservabile, come ad esempio l'energia totale, lo sarà. Definiamo

$$F[n] := \langle \Psi[n] | T + W | \Psi[n] \rangle \quad (2.3)$$

chiamato funzionale universale poiché dipende dalle particelle che costituiscono il sistema e non dal potenziale esterno. Possiamo esprimere il funzionale energia nel seguente modo

$$E[n] = F[n] + \int V_{ext}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.4)$$

Si dimostra che *l'energia dello stato, una volta mostrata la relazione biunivoca tra Ψ ed n , fondamentale può essere determinata dal principio variazionale minimizzando il funzionale $E[n]$*

$$E_0 = \min_{\{n \in \mathcal{V}\}} \{E_{V_{ext}}[n]\} \quad (2.5)$$

dove le n sono tutte le funzioni, il cui insieme di appartenenza chiamiamo $\mathcal{V}$, che corrispondono alla densità dello stato fondamentale in un qualche potenziale V_{ext} .

2.1.3 Equazioni di Kohn - Sham

I due teoremi di Hohenberg e Kohn, seppur ben posti, non permettono di calcolare $n(\mathbf{r})$ dello stato fondamentale né forniscono la forma funzionale di $F[n]$.

Kohn e Sham, nel 1965 [21], sviluppano un metodo per risolvere il problema: introducono un sistema equivalente costituito da N particelle non interagenti, sottoposte a un potenziale esterno, la cui densità coincide con quella del problema iniziale. Per il sistema equivalente possiamo scrivere esplicitamente l'energia cinetica

$$T' = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \Psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.6)$$

dove $\Psi_i(\mathbf{r})$ sono gli orbitali di Kohn Sham: funzioni d'onda di particella singola del sistema non interagente. È quindi possibile esprimere la densità come

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\Psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.7)$$

Si ha quindi

$$F[n] = T'[n] + E_{int}[n] \quad (2.8)$$

dove

$$E_{int}[n] = E_H[n] + E_{xc}[n] \quad (2.9)$$

E_H è il termine diretto di Hartree legato alla repulsione Coulombiana mentre E_{xc} è termine di scambio e correlazione relativo all'interazione residua. Si ottiene quindi

$$E[n] = T'[n] + V_{ext} + E_H[n] + E_{xc}[n] \quad (2.10)$$

Risulta così che l'energia è somma di termini dipendenti dal funzionale densità e poiché, dall'equazione (2.5), l'energia dello stato fondamentale ne è il minimo, deve esserne nulla la derivata funzionale

$$\delta E = 0 \quad (2.11)$$

Si tratta di un minimo vincolato dalle condizioni di normalizzazione e ortonormalità delle autofunzioni

$$\int \delta n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0 \quad (2.12)$$

$$\delta \left(E - \sum_i \varepsilon_i \int \Psi_i^*(\mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) = 0 \quad (2.13)$$

Sfruttando le identità

$$\frac{\delta n}{\delta \Psi_i^*} = \Psi_i \quad \frac{\delta}{\delta \Psi_i^*} = \frac{\delta n}{\delta \Psi_i^*} \frac{\delta}{\delta n} = \Psi_i \frac{\delta}{\delta n} \quad (2.14)$$

ed eseguendo la variazione di (2.11) rispetto a $\Psi_i^*(\mathbf{r})$ si ha

$$\frac{\delta}{\delta \Psi_i^*} \left[\sum_i -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \Psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + E_{int} + \int V_{ext}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \sum_i \varepsilon_i \int \Psi_i^*(\mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right] = 0 \quad (2.15)$$

si ottengono le equazioni autoconsistenti di Kohn Sham

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\delta E_{int}[n]}{\delta n} + V_{ext}(\mathbf{r}) \right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

Definendo

$$\frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n} + V_{ext}(\mathbf{r}) = V_{ks}(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

le equazioni (2.16) diventano

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ks}(\mathbf{r}) \right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

È quindi chiaro che $V_{ks}(\mathbf{r})$ risulta essere il potenziale efficace del sistema.

La teoria qui esposta fa riferimento al caso elettronico ed è bene precisare che sussistono delle differenze con il caso nucleare di nostro interesse: il sistema nucleare è caratterizzato al suo interno da un'interazione forte che fa sì che sia auto-legato, non presenta quindi un potenziale esterno. Un'altra differenza è data dalla diversa tipologia di nucleoni e di conseguenza sulla densità, che porterà ad avere potenziali efficaci distinti nei due casi.

Facendo riferimento a quanto spiegato in sezione 1.1.2 risulta chiaro che il potenziale ha dipendenze ben più complesse dalla sola densità; questo è valido anche per i sistemi elettronici: se, ad esempio, si vogliono descrivere i fenomeni magnetici è necessario comprendere anche un termine sulla densità di spin.

2.1.4 Formulazione di Levy-Lieb

Si è mostrato che l'energia dello stato fondamentale si ottiene dalla condizione (2.5) in cui le funzioni $n(\mathbf{r})$ appartengono all'insieme $\mathcal{N}$ delle funzioni n -rappresentabili, costituito dalle funzioni che sono densità dello stato fondamentale, eventualmente degenerare, di una opportuna Hamiltoniana. Tuttavia, non è assicurato che ognuna delle funzioni $n(\mathbf{r})$ sufficiente regolare, non negativa e normalizzata (cioè il cui integrale dia il numero totale di particelle) appartenga a tale insieme, rendendo il problema della rappresentabilità di una certa rilevanza. Di fatto, se una certa densità, per esempio ottenuta tramite calcolo numerico, minimizza il funzionale energia, ma non appartiene al suo dominio di definizione, è da rigettare.

Si ha dunque l'esigenza di estendere il funzionale di Hohenberg e Kohn ad un dominio più ampio e del quale si conosca la caratterizzazione. Un'opzione è la proposta di Levy e Lieb [24, 25], in cui la densità appartiene all'insieme $\mathcal{N}$ delle funzioni n -rappresentabili costituito dalle funzioni non negative che possono essere rappresentate come densità corrispondenti a una qualche funzione d'onda antisimmetrica $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ di un sistema di N particelle.

Si può dimostrare che tale insieme comprende tutte le funzioni non negative, integrabili e "sufficientemente regolari"

$$\mathcal{N} = \left\{ n(\mathbf{r}) : n(\mathbf{r}) \geq 0, \int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N, \int |\nabla \sqrt{n(\mathbf{r})}|^2 d\mathbf{r} < +\infty \right\} \quad (2.19)$$

Introduciamo il funzionale di Levy-Lieb $F_{LL}[n]$ come

$$F_{LL}[n] = \liminf_{\Psi \rightarrow n} \langle \Psi | \hat{T} + \hat{W} | \Psi \rangle \quad (2.20)$$

e definito sull'insieme delle funzioni N -rappresentabili. La notazione $\Psi \leftarrow n$ indica che la ricerca dell'estremo inferiore è estesa a tutte le funzioni d'onda, normalizzate e completamente antisimmetriche di N particelle, tali da riprodurre la densità $n(\mathbf{r})$.

Se la densità appartiene all'insieme delle funzioni per cui vale (2.5), il primo teorema di Hohenberg e Kohn garantisce che vi sia una corrispondenza biunivoca tra $n(r)$ e Ψ . Dunque

$$F_{LL}[n] = \langle \Psi[n] | \hat{T} + \hat{W} | \Psi[n] \rangle = F[n] \quad (2.21)$$

Risulta così verificato che il funzionale di Levy-Lieb coincide con quello di Hohenberg e Kohn sull'insieme $\mathcal{V} \subset \mathcal{N}$. L'impostazione di Levy-Lieb è una corretta generalizzazione di quella originaria di Hohenberg e Kohn.

2.2 Problema inverso

2.2.1 Introduzione

Il problema diretto della DFT permette, una volta noto il funzionale di energia, di ricavare la densità dello stato fondamentale di un sistema di N particelle interagenti. Il successo di questa teoria si deve alla disponibilità di funzionali approssimati di scambio e correlazione utilizzati come input [45]. È possibile invertire tale processo dando in ingresso una densità e ricavando il potenziale: i teoremi di Hohenberg e Kohn garantiscono la corrispondenza biunivoca tra la densità dello stato fondamentale e il potenziale esterno. Il potenziale così ricavato è definito a meno di una costante, infatti, nello sviluppo della DFT di Kohn-Sham, gli orbitali e gli autovalori sono quantità ausiliari che non hanno un vero senso fisico, ad eccezione dell'energia dell'ultimo orbitale occupato che risulta essere pari all'energia di ionizzazione per un sistema elettronico o all'energia di separazione nel caso nucleare [34]. Questo permette di fissare il valore assoluto del potenziale di Kohn-Sham.

Nell'ambito della fisica nucleare la possibilità di determinare l'esatto potenziale v_{ks} risulta promettente poiché costituisce un metodo diverso di derivazione del potenziale efficace rispetto alle strategie comunemente utilizzate basate su procedure complesse di fit dei dati sperimentali.

2.2.2 I problemi inversi

Dal punto di vista matematico, ci si può chiedere se il problema inverso di Kohn-Sham sia ben posto. In accordo con Hadamard [40], il problema è ben posto se

- esiste una soluzione del problema
- tale soluzione è unica
- la soluzione dipende con continuità dai dati del problema

e se una sola di queste proprietà è violata il problema risulta essere mal posto. La maggioranza dei problemi diretti risulta essere ben posta mentre ciò non è sempre vero per i problemi inversi. Per esempio, consideriamo il caso di una particella di massa unitaria che si muove di moto rettilineo causato da una forza $q(t)$ che dipende dal tempo. Ipotizziamo che tale particella abbia una traiettoria definita dalla coordinata u e che si trovi nell'origine del sistema di riferimento, $u = 0$ con velocità nulla al tempo $t = 0$. In base alle leggi di Newton, il moto della particella è descritto da $u(t)$ che soddisfa il problema di Cauchy

$$\begin{cases} \frac{d^2 u(t)}{dt^2} = q(t) & t \in [0, T] \\ u(0) = 0, & \frac{du(t)}{dt} = 0 \end{cases} \quad (2.22)$$

dove T è un istante generico di tempo successivo a $t = 0$.

Supponiamo ora che la forza $q(t)$ non sia nota ma che la coordinata $u(t)$ possa essere misurata ogni istante o in qualche punto dell'intervallo temporale: viene così formulato il problema inverso. Si può dimostrare che tale problema è mal posto: se infatti prendiamo $u(t)$, soluzione del problema diretto per una qualche $q(t)$, e aggiungiamo una perturbazione

$$u_n(t) = u(t) + \frac{1}{n} \cos(nt) \quad (2.23)$$

che corrisponde a

$$q_n(t) = q(t) - n \cos(nt) \quad (2.24)$$

otteniamo che $\lim_{n \rightarrow \infty} \|u - u_n\|$ tende a zero mentre $\lim_{n \rightarrow \infty} \|q - q_n\|$ tende a ∞ .

Non c'è prova che il problema inverso di Kohn-Sham sia ben posto, tranne che per sistemi discretizzati, ma questo non implica che sia necessariamente mal posto [19]. Spesso, però, errori e informazioni mancanti nella densità in input, come quelli a cui sono soggette densità derivanti da esperimenti, possono portare a delle violazioni delle condizioni di Hadamard. In tal caso, è necessario prendere particolari precauzioni nella costruzione dei metodi di inversione affinché convergano ad una reale soluzione del problema.

La maggioranza delle tecniche utilizzate per affrontare i problemi inversi fa uso di metodi di regolarizzazione che permettono di risolvere anche quelli mal posti: l'idea alla base di questi metodi è quella di sostituire il problema iniziale con uno approssimato, a patto che presenti solo piccoli cambiamenti rispetto a quello originario, e che ammetta un'unica soluzione [19].

2.2.3 Inversione delle equazioni di Kohn-Sham e metodo CV

È possibile riassumere il metodo Kohn-Sham, con le equazioni viste in precedenza

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ks}(\mathbf{r}) \right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.25)$$

$$V_{ks}(\mathbf{r}) = V_{ext}(\mathbf{r}; [n]) + V_H(\mathbf{r}; [n]) \quad (2.26)$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i^N |\Psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.27)$$

Il problema diretto e quello inverso hanno in comune lo stesso sistema di equazioni ma diverse incognite, di conseguenza hanno un diverso metodo di risoluzione: se nel primo caso le incognite sono date dalle autofunzioni, dagli autovalori e dalla densità avendo noto il potenziale V_{ks} , nel secondo caso la densità risulta essere data e il potenziale una nuova incognita.

Delineiamo ora la strategia di risoluzione utilizzata all'interno di questo lavoro, che si fonda sul metodo *constrained-variational* CV, basata sulla formulazione di Levy-Lieb della DFT, descritta in 2.1.4.

La quantità da minimizzare nel metodo CV è il valore di aspettazione dell'energia cinetica del sistema non interagente. Il funzionale prende il nome di funzione obiettivo del problema

$$T_s[\{\phi\}] = \sum_{i=1}^{N_{orb}} d_i \int \phi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \phi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.28)$$

Tale quantità viene minimizzata imponendo due vincoli

1 ortonormalità degli orbitali

$$G_{i,j}[\{\phi_i\}] = \int \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{i,j} \quad (2.29)$$

2 densità del sistema interagente uguale a quella del sistema non interagente

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i^{N_{orb}} d_i |\phi_i(\mathbf{r})|^2 = \tilde{n}(\mathbf{r}) \quad (2.30)$$

dove $\phi_i(\mathbf{r})$ sono gli orbitali di singola particella e d_i indica il numero di occupazione dell' i -esimo orbitale. Se si considerano, ad esempio, sistemi con solo shell chiuse allora $d_i = 2j_i + 1$ nella base accoppiata $|n, l, j\rangle$.

Introduciamo i moltiplicatori di Lagrange associati ai vincoli, in particolare sia $\epsilon_{i,j}$ quello associato al vincolo in (2.29) e $U(\mathbf{r})$ quello relativo al vincolo di (2.30) e definiamo nel modo seguente il funzionale costo J

$$J[\{\phi_i\}, U(\mathbf{r}), \{\epsilon_{i,j}\}] = T_s[\{\phi_i\}] + \int U(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) - \sum_{i=1}^{N_{orb}} \sum_{j \leq i} d_i \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.31)$$

In questo modo è possibile passare da una minimizzazione vincolata di $T_s[\{\phi\}]$ ad una minimizzazione libera del funzionale costo che include i moltiplicatori di Lagrange.

Il problema risulta dunque definito dalle seguenti equazioni

$$\delta J[\{\phi_i\}], U(\mathbf{r}), \{\epsilon_{i,j}\} = 0 \quad (2.32)$$

Risolvere il problema consiste quindi nel determinare le funzioni d'onda $\phi_i(\mathbf{r})$ e i moltiplicatori $U(\mathbf{r}), \{\epsilon_{i,j}\}$ che soddisfano l'equazione (2.32). Osserviamo però che l'ottimizzazione del funzionale costo può condurre ad una forma non diagonale dell'equazione di Kohn-Sham in quanto le $\phi_i(\mathbf{r})$ non sono le funzioni d'onda dell'equazione KS e $\epsilon_{i,j}$ non corrispondono agli autovalori. Nonostante ciò, il set di autofunzioni $\phi_i(\mathbf{r})$ e la matrice $\epsilon_{i,j}$ sono legati agli orbitali e alla matrice degli autovalori KS da una trasformazione unitaria. Allo stesso tempo l'equazione (2.31) ci dice che il moltiplicatore di Lagrange $U(\mathbf{r})$ è il potenziale di Kohn-Sham, definito a meno di una costante. In questo senso è possibile vedere come il metodo CV risulta essere una formulazione diretta del problema inverso di Kohn-Sham.

Capitolo 3

Implementazione del metodo CV

Nel capitolo precedente abbiamo esposto in forma generale il metodo *constrained variational*. Spieghiamo ora come questo debba essere sviluppato, al fine di poterlo applicare a sistemi di interesse fisico, e implementato in un programma numerico. Si tenga presente che tale metodo è già stato applicato a sistemi elettronici [2].

Le equazioni (2.32) risultano essere molto complesse in quanto coinvolgono un numero considerevole di funzioni d'onda, ognuna dipendente da tre variabili spaziali. Si è quindi deciso di limitarsi a studiare i sistemi con simmetria sferica: in questo modo è possibile ricondurre il problema tridimensionale ad uno nella sola variabile radiale r semplificando così la realizzazione pratica dell'algoritmo a discapito, però, del campo di applicabilità del metodo che rimane ristretto, nell'ambito della fisica nucleare, a sistemi non deformati nel riferimento intrinseco ed, in particolare, a sistemi con shell chiuse.

Ricaviamo ora la forma esplicita delle equazioni del metodo CV in simmetria sferica.

3.1 Metodo CV per sistemi con simmetria sferica

La prima quantità su cui porre attenzione è la densità: sotto l'ipotesi di simmetria sferica, assumendo quindi che tutte le shell siano complete, risulta essere

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha, \sigma} |\varphi_{\alpha}(\mathbf{r}, \sigma)|^2 \quad (3.1)$$

dove le funzioni d'onda, scritte nella base accoppiata $\alpha = (nljm_j)$, sono

$$\varphi_{\alpha}(r, \theta, \phi, \sigma) = \frac{u_{nlj}(r)}{r} Y_{lsjm_j}(\theta, \phi, \sigma) \quad (3.2)$$

$u_{nl}(r)$ sono le funzioni radiali ridotte ed, essendo l'Hamiltoniana non dipendente esplicitamente dal tempo, reali mentre il termine $Y_{lsjm_j}(\theta, \phi, \sigma)$ condensa la dipendenza dalle variabili angolari, contenute nelle armoniche sferiche, e dallo spin

$$Y_{lsjm_j}(\theta, \phi, \sigma) = \sum_{m_l m_s} \langle lsm_l m_s | lsjm_j \rangle \chi_{sm_s}(\sigma) \quad (3.3)$$

La densità dipende soltanto dalla componente radiale della funzione d'onda

$$n(r) = \sum_{nlj} \frac{|u_{nlj}(r)|^2}{r^2} \frac{2j+1}{4\pi} \quad (3.4)$$

La seconda quantità d'interesse è il funzionale dell'energia cinetica T_s che ha una dipendenza dall'operatore Laplaciano. In coordinate sferiche questo diventa

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\Lambda^2}{r^2} \quad (3.5)$$

dove Λ^2 , operatore di Legendre, dipende solamente dalle variabili angolari e nel caso tridimensionale risulta avere la seguente forma

$$\Lambda^2 = \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (3.6)$$

Si può dimostrare che Λ^2 è proporzionale a $\mathbf{L}^2$, in particolare $\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \Lambda^2$. Le armoniche sferiche però sono autofunzioni del quadrato del momento angolare con autovalori $\hbar^2 l(l+1)$ da cui

$$\Lambda^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (3.7)$$

È possibile quindi procedere al calcolo dell'espressione del funzionale energia cinetica in simmetria sferica

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}, \sigma) = \left[\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) \right] \frac{Y(\theta, \phi, \sigma)}{r} \quad (3.8)$$

Sapendo che l'elemento di volume in coordinate sferiche $d\mathbf{r}$ è pari a $r^2 dr d\Omega$ abbiamo

$$\sum_{\sigma} \int \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \nabla^2 \phi_i(\mathbf{r}, \sigma) d\mathbf{r} = \sum_{\sigma} \int |Y(\theta, \phi, \sigma)|^2 d\Omega \int_0^{\infty} \left(\frac{u^*(r)}{r} \right) \frac{1}{r} \left[\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) \right] r^2 dr \quad (3.9)$$

L'integrale si riduce a un integrale unidimensionale poiché le armoniche sferiche sono normalizzate

$$\sum_{\sigma} \int \phi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \nabla^2 \phi_i(\mathbf{r}, \sigma) d\mathbf{r} = \int_0^{\infty} u^*(r) \left[\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) \right] dr \quad (3.10)$$

Il funzionale energia cinetica in simmetria sferica risulta quindi

$$T_s[\{u_j\}] = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^{N_{orb}} \int_0^{\infty} \left[|u_j'(r)|^2 \frac{l(l+1)}{r^2} |u_j(r)|^2 \right] \quad (3.11)$$

Consideriamo ora l'equazione del vincolo (2.30), il passaggio alle coordinate sferiche è reso più chiaro riscrivendo l'equazione in forma integrale

$$G_d[\{\phi_j\}; U(r)] = \int U(\mathbf{r}) [n(\mathbf{r}) - \tilde{n}(\mathbf{r})] d\mathbf{r} = 0 \quad (3.12)$$

Con passaggi analoghi a quelli precedenti l'equazione diventa

$$G_d[\{\phi_j\}; U(r)] = \int_0^{\infty} U(r) \left[\left(\sum_{j=1}^{N_{orb}} d_j u_j^2(r) \right) - 4\pi r^2 \tilde{n}(\mathbf{r}) \right] dr \quad (3.13)$$

Per il vincolo sull'ortonormalità, equazione (2.29), si ha

$$\left(\sum_{\sigma} \int Y_i^*(\theta, \phi, \sigma) Y_j(\theta, \phi, \sigma) d\Omega \right) \left(\int_0^{\infty} u_i(r) u_j(r) dr \right) = \delta_{ij} \quad (3.14)$$

Per le proprietà delle armoniche sferiche l'integrale sulle variabili angolari è pari a $\delta_{l_i l_j} \delta_{j_i j_j}$. Se $l_i \neq l_j$ o $j_i \neq j_j$ il vincolo è automaticamente soddisfatto, in caso contrario è necessario imporre il vincolo di ortonormalità sulle funzioni d'onda radiali ridotte

$$G_{ij}[\{u_i\}] = \int_0^{\infty} u_i(r) u_j(r) dr = \delta_{ij} \text{ con } i = 1 \dots N_{orb}, j \leq i \quad (3.15)$$

3.1.1 Riscaldamento

Gli autori di [20] osservano che l'utilizzo delle differenze finite, per approssimare gli operatori di derivazione (Par. 3.2), non risultano essere molto accurate nelle regioni in cui le funzioni d'onda decadono esponenzialmente portando ad errori considerevoli. Per ovviare al problema viene suggerito di utilizzare degli orbitali riscaldati $\{f_j(\mathbf{r})\}$ definiti come $f_j(\mathbf{r}) = \frac{\phi_j(\mathbf{r})}{\sqrt{\tilde{n}(\mathbf{r})}}$.

Notando che $\tilde{n}(\mathbf{r}) \sim |\phi(\mathbf{r})|^2$ le funzioni $\{f_j\}$ risultando essere dell'ordine di grandezza dell'unità: questo permette di evitare errori numerici che possono insorgere quando si combinano numeri con ordini di grandezza molto differenti.

Applicando il problema a sistemi a simmetria sferica, gli autori del lavoro [31] utilizzano una formula concettualmente uguale ma leggermente diversa

$$u_j(r) = \sqrt{4\pi\tilde{n}r} f_j(r) \quad (3.16)$$

3.1.2 Regularizzazione

Come discusso in precedenza i problemi inversi hanno bisogno di metodi di regolarizzazione per poter essere risolti correttamente. Gli autori di [20] suggeriscono di regolarizzare il funzionale energia cinetica imponendo un vincolo sulla norma delle derivate funzioni $f_j(r)$. In questo modo, nella ricerca delle soluzioni del problema di minimizzazione, vengono penalizzate le funzioni che presentano rapide variazioni.

Vengono così introdotti il funzionale penalità $R[\{f_j\}; \alpha]$ e il parametro di penalità $\alpha > 0$

$$R(\{f_j\}; \alpha) = \alpha \sum_{j=1}^{N_{orb}} d_j \int |\dot{f}_j(r)|^2 dr = -\alpha \sum_{j=1}^{N_{orb}} \int f_j(r) \ddot{f}_j(r) dr \quad (3.17)$$

L'oggetto della minimizzazione non sarà più il funzionale energia cinetica T_s , ma il funzionale regolarizzato O

$$O[\{f_j\}; \alpha] = T_s[\{f_j\}] + R[\{f_j\}; \alpha] \quad (3.18)$$

3.1.3 Riscrittura del problema

Risulta quindi opportuno riscrivere il problema in funzione delle nuove variabili.

La relazione

$$n(r) = \tilde{n}(r) \sum_{j=1}^{N_{orb}} d_j f_j^2(r) \quad (3.19)$$

permette di riscrivere il vincolo sulla densità in una forma particolarmente semplice:

$$g_d(\{f_j\}) = \sum_{j=1}^{N_{orb}} d_j f_j^2(r) = 1 \quad (3.20)$$

Per i vincoli di ortonormalità si ha

$$G_{ij}[\{f_i\}] = \int_0^{infy} 4\pi \tilde{n}(r) r^2 f_i(r) f_j(r) dr = 1 \quad se \ l_i = l_j, j_i = j_j; i = 1 \dots N_{orb}, j \leq i \quad (3.21)$$

Il calcolo del funzionale obiettivo risulta essere più laborioso, si riporta qui il risultato e si rimanda all'Appendice A per i dettagli

$$O[\{f_j\}] = \sum_j d_j \int dr \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) \left[C_0(r, j) f_j^2(r) + C_1(r) f_j(r) \dot{f}_j(r) + C_2(r) f_j(r) \ddot{f}_j(r) \right] - \alpha f_j(r) \ddot{f}_j(r) \right\} \quad (3.22)$$

dove

$$\begin{aligned} C_2(r) &= A^2(r) = r^2 \tilde{n}(r) \\ C_1(r) &= \frac{d}{dr} C_2(r) = r^2 \tilde{n}'(r) + 2r \tilde{n}(r) \\ C_0(r, j) &= -l_j(l_j + 1) \tilde{n}(r) + r \tilde{n}'(r) + \frac{r^2}{2} \tilde{n}''(r) - \frac{r^2}{4} \frac{[\tilde{n}'(r)]^2}{\tilde{n}(r)} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Tutte le equazioni viste in questo paragrafo sono quelle fondamentali per il metodo CV applicato a sistemi a simmetria sferica.

3.2 Implementazione numerica

Con le equazioni scritte nel precedente paragrafo è possibile implementare il metodo CV in un programma.

La minimizzazione vincolata di $O[\{f_j(r)\}]$ viene effettuata facendo uso di una libreria specializzata, IPOPT (Interior Point OPTimizer), [20], tramite la quale è possibile determinare le funzioni d'onda riscalate, $\{f_j(r)\}$ soluzioni del problema. Una volta determinate tali funzioni d'onda le equazioni di Eulero-Lagrange vengono ricondotte ad un sistema algebrico lineare, nel quale le incognite sono gli autovalori ϵ_{jk} e il potenziale di Kohn-Sham.

3.2.1 IPOPT

Dal punto di vista matematico il metodo CV risulta essere un problema non lineare di ottimizzazione vincolata. Gli autori di [20] propongono di usare la libreria IPOPT, specializzata nel risolvere problemi di minimizzazione di grandi dimensioni, per la soluzione del problema. Si rimanda a [47], [46] per dettagli sull'algoritmo e sulla matematica.

Il problema viene definito tramite l'implementazione dell'espressione della funzione obiettivo e di quella dei vincoli ma risultano necessari anche il gradiente della funzione obiettivo, lo Jacobiano

dei vincoli e l'Hessiana (4.3) del problema completo: l'algoritmo richiede che venga specificata la struttura delle matrici di queste ultime. Viene inoltre richiesto di fornire il punto di partenza della procedura di ottimizzazione che permette di scegliere la stima iniziale delle variabili del problema: se viene scelto un punto sufficientemente vicino alla soluzione del problema l'algoritmo converge rapidamente, al contrario è possibile non raggiungere la convergenza a un punto stazionario. La scelta del punto di partenza risulta importante anche per un'altra ragione: una volta che IPOPT individua il candidato minimo locale del problema non ha modo di determinare se ne esistano altri. È quindi possibile che la soluzione risulti corretta dal punto di vista matematico ma che non soddisfi alcuni criteri dal punto di vista fisico. Queste considerazioni si applicano soprattutto a problemi dipendenti da un gran numero di variabili, tra i quali lo stesso metodo CV.

3.2.2 Discretizzazione

Le equazioni scritte nel Paragrafo 3.1.3, espresse in forma di funzioni integrali, sono definite su un insieme di funzioni $\{f_j(r)\}$. Per poter essere implementate numericamente è necessario che il dominio di definizione (un intervallo chiuso $[a, b]$) venga sostituito da un insieme discreto di punti, r_i definito nel seguente modo

$$r_i = a + hi \quad 0 \leq i < N_{points} \quad (3.24)$$

dove $h = \frac{(b-a)}{N_{points}}$ è il passo della griglia.

Le funzioni $\{f_j(r)\}$ sono quindi sostituite da vettori ognuno costituito da N_{points} elementi. Da qui utilizzeremo la notazione $f_i^j = f_j(r_i)$, dove l'apice indica il numero di orbitale e il pedice la posizione in cui viene valutata la funzione.

Notiamo che il funzionale obiettivo J dipende anche dalle derivate prime e seconde delle $f_j(r)$ che devono essere quindi approssimate con opportune combinazioni, e la scelta degli elementi di f_i^j . Viene utilizzato il metodo delle differenze finite al quarto ordine, la scelta di tale metodo è data sia dall'accuratezza numerica che per la semplicità, nel quale le derivate sono espresse da

$$\dot{f}_i^j = \sum_{k=-2}^{+2} \frac{w_k}{h} f_{i+k}^j \quad \ddot{f}_i^j = \sum_{k=-2}^{+2} \frac{v_k}{h^2} f_{i+k}^j \quad (3.25)$$

Tale equazione risulta non valida ai bordi del dominio di definizione, cioè quando i assume i valori estremi $0, 1, N-1, N-2$, è possibile ovviare al problema utilizzando la formula delle differenze finite asimmetriche (si rimanda all'Appendice A).

Anche l'operatore integrale deve essere approssimato con una somma finita di termini. È stato scelto di effettuare l'approssimazione tramite metodo di Simpson. Per una generica funzione F si ha

$$\int_a^b F(x)dx \approx \frac{h}{3}(F_0 + 4F_1 + 2F_2 + \dots + F_M) + \frac{h}{3} \sum_{k=0}^M c_k F_k \quad (3.26)$$

L'errore che si commette nell'approssimare l'integrale con la formula di Simpson è dell'ordine di h^5 .

Tutto questo permette di esprimere il funzionale obiettivo e i vincoli come funzioni scalari di più variabili indipendenti. Ricaviamo le espressioni di cui fa uso il programma

$$O(\{f_i^j\}) = \sum_{i=0}^{N_{points}} c_i \sum_{j=1}^{N_{orb}} d_j \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) (C_0(r, j) (f_i^j)^2 + C_1(i) f_i^j \dot{f}_i^j + C_2(i) f_i^j \ddot{f}_i^j) - \alpha f_i^j \ddot{f}_i^j \right] \quad (3.27)$$

$$g_d(i) = \sum_{j=1}^{N_{orb}} d_j (f_i^j)^2 = 1 \quad (3.28)$$

$$G_{ij}(\{f_q^p\}) = \sum_{p=0}^{N_{points}} c_p 4\pi r_p^2 \tilde{n}(p) (f_p^1 f_p^j) = \delta_{ij} \quad j \leq i \quad (3.29)$$

3.2.3 Calcolo del potenziale

La soluzione di un problema di ottimizzazione vincolata fornita da IPOPT comprende i valori sia delle variabili del problema, sia dei moltiplicatori di Lagrange associati ai vincoli. Nel metodo CV, vengono restituiti i valori delle funzioni riscalate, dei moltiplicatori dei vincoli di ortonormalità e dei moltiplicatori associati al vincolo di densità.

Nella definizione del problema all'interno di IPOPT viene perso il legame tra il potenziale $v_{ks}(r)$ e i moltiplicatori di Lagrange viene perso. Si è scelto di seguire un'altra strategia: il potenziale viene ricavato sfruttando la conoscenza degli orbitali che risolvono il problema inverso delle equazioni di Eulero-Lagrange. Facendo riferimento al paragrafo 3.1

$$L = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^{N_{orb}} d_j \left(\dot{u}_j^2(r) + \frac{l_j(l_j+1)}{r^2} u_j^2(r) \right) + U(r) \sum_{j=1}^{N_{orb}} d_j u_j^2(r) - \sum_{j=1}^{N_{orb}} j = 1^{N_{orb}} \sum_{i=1}^j \epsilon_{ij} u_j(r) u_i(r) \quad (3.30)$$

Le corrispondenti equazioni di Eulero-Lagrange sono

$$-\frac{\hbar^2}{2m} 2d_k \left(\ddot{u}_k(r) - \frac{l_k(l_k+1)}{r^2} u_k(r) \right) + 2d_k U(r) u_k(r) = \sum_{j=1}^{N_{orb}} d_j \epsilon_{ji} (1 + \delta_{jk}) u_j(r) \quad (3.31)$$

È possibile determinare le funzioni radiali direttamente dalle funzioni riscalate e il metodo delle differenze finite permette di calcolare la matrice delle derivate seconde $\ddot{u}_i^j$. Si ottengono in questo modo N_{orb} equazioni che costituiscono un sistema lineare nelle incognite ϵ_{jk} e $v_{ks}(r_i)$. L'utilizzo di una libreria specializzata in algebra lineare, Eigen, consente di calcolare la soluzione e quindi di dedurre il potenziale di Kohn-Sham in tutti i punti della griglia.

Capitolo 4

Risultati

In questo capitolo riportiamo i risultati ottenuti applicando il problema inverso alle equazioni di Kohn-Sham utilizzando il metodo di inversione *constrained-variational* (CV) descritto in 2.2.3. Tale metodo costituisce una soluzione al problema inverso della DFT che, a partire dalla conoscenza della densità di un sistema nel suo stato fondamentale, permette di determinare il potenziale efficace agente sulle particelle che lo costituiscono.

I nuclei analizzati sono nuclei magici tra cui, in particolare, alcuni doppiamente magici come ^{16}O o ^{40}Ca ; questo ha permesso di lavorare assumendo valida la condizione di simmetria sferica e la condizione di poter trascurare gli effetti di pairing.

Le densità utilizzate derivano da due metodi *ab initio* diversi. Verranno prima discussi i risultati relativi alle densità ricavate tramite metodo Quantum Monte Carlo (QMC) e successivamente si discuteranno i risultati relativi alle densità relative al metodo delle funzioni di Green auto-consistenti (SCGF). Infine verrà presentato un confronto tra i due metodi. Entrambi i metodi sono basati su Hamiltoniane chirali non relativistiche ma con termini di interazione realistici differenti e che verranno meglio specificati nelle sezioni 4.1 e 4.2

I risultati esposti sono stati ottenuti mantenendo un passo della griglia di 0.1 fm e il parametro di penalità $\alpha = 0$ come descritto in 3.1.2.

Per meglio comprendere le osservazioni che si faranno in seguito introduciamo brevemente dei potenziali di riferimento. Nella figura 4.1 è mostrato il potenziale di Woods-Saxon relativo al Calcio

$$V_{WS} = \frac{-V_0}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}} \quad \text{dove} \quad V_0 = 52 \text{ MeV}, R = 4.3 \text{ fm}, a = 0.662 \text{ fm}$$

potenziale teorico associato al modello a shell introdotto in 1.1.3. Ha la caratteristica di essere pressoché piatto nella regione interna (tra 0 – 2 fm), non presenta dei punti di minimo e ha una diffusività standard nel raggiungere il suo massimo di 0 MeV. Nelle figure 4.2, 4.3 sono presentati i grafici dei potenziali per i neutroni e per i protoni derivanti da densità Hartree-Fock utilizzando un potenziale di Skyrme. L'andamento di questi due potenziali è molto differente rispetto a quello precedente: Hartree-Fock presenta più oscillazioni legate all'auto-consistenza con un densità le cui funzioni d'onda corrispondono a specifici orbitali e di conseguenza anche le osservabili estratte dal metodo, tra cui la densità, lo saranno a loro volta. Questi potenziali permettono di osservare importanti caratteristiche che verranno discusse in seguito nei nostri risultati: il potenziale relativo a neutroni asintoticamente tende a zero, il potenziale dei neutroni prima di andare a zero, si salda con continuità alla barriera Coulombiana $E_{CB} = Ze^2/R$. È possibile notare inoltre come nella parte interna i potenziali presentino delle oscillazioni.

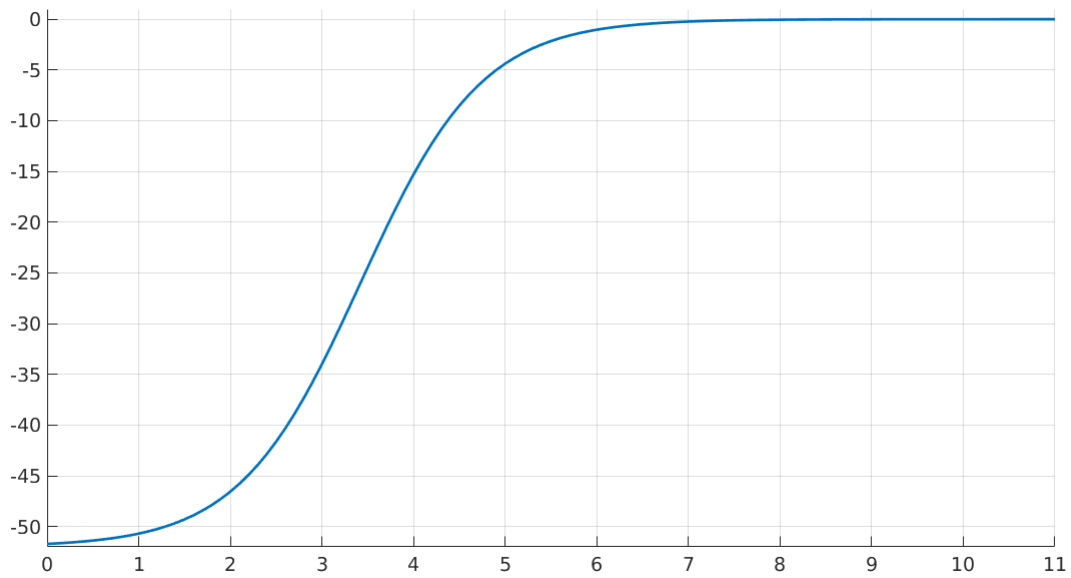


Figura 4.1: Potenziale di Woods-Saxon del ^{40}Ca .

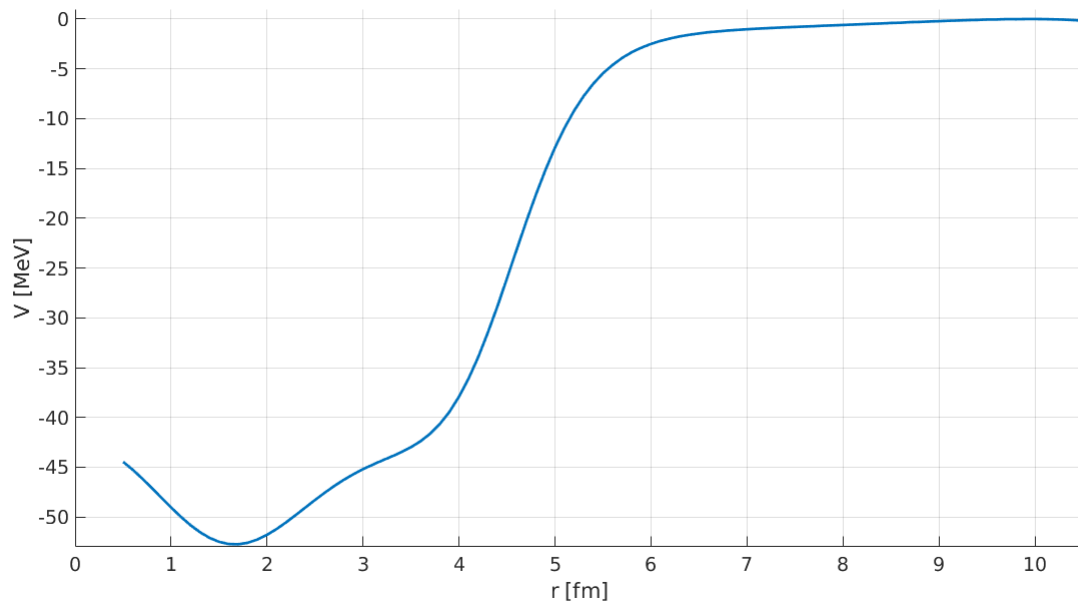


Figura 4.2: Potenziale relativo al nucleo ^{40}Ca per neutroni ottenuto con densità di tipo *Hartree-Fock SkX*.

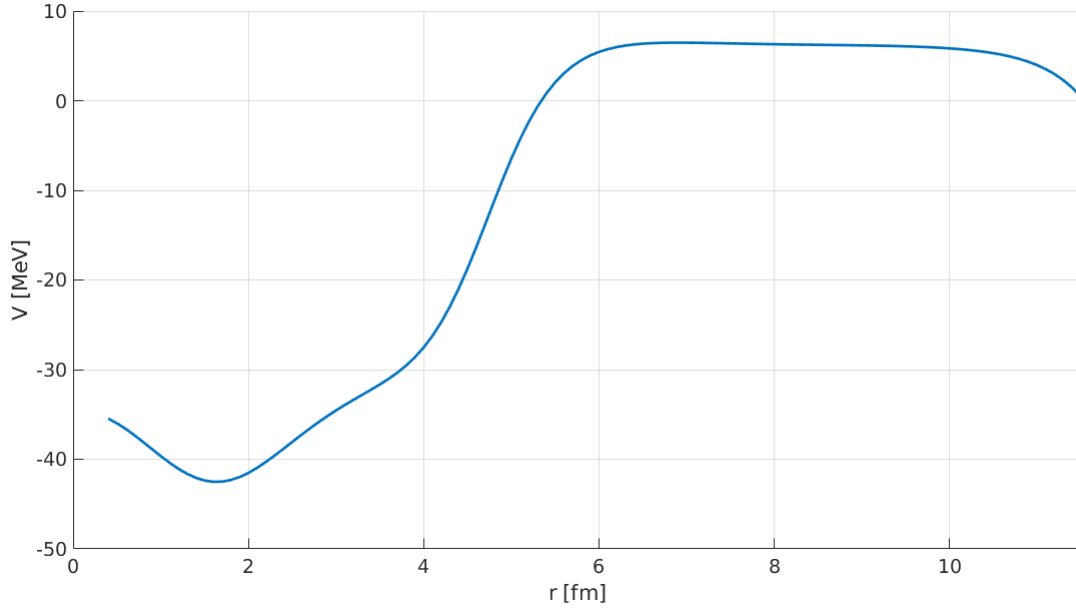


Figura 4.3: Potenziale relativo al nucleo ^{40}Ca per protoni ottenuto con densità di tipo *Hartree-Fock SkX*.

4.1 QMC

Le densità presentate in questa sezione sono state ottenute attraverso il metodo Auxiliary Field Diffusion Monte Carlo (AFDMC) [15] con un potenziale fenomenologico $AV4' + UIX_c$, costituito dall'interazione nucleone-nucleone di Argonne 4 ($AV4'$) [27] più la parte centrale a tre nucleoni del potenziale Urbana IX (UIX_c) [28]. AFDMC appartiene ad una famiglia di metodi che è basata sull'evoluzione di una funzione d'onda di prova a tempi immaginari per ricostruire lo stato fondamentale del sistema.

Una caratteristica di queste densità è che, insieme alla loro costruzione, è possibile ottenere anche il loro errore statistico in ogni punto dell'intervallo.

4.1.1 ^{40}Ca

Il calcio 40 è un nucleo doppiamente magico composto da 20 protoni e 20 neutroni e ha un raggio, secondo la definizione in (1.4), pari a $R = 4.3$ fm.

Neutroni

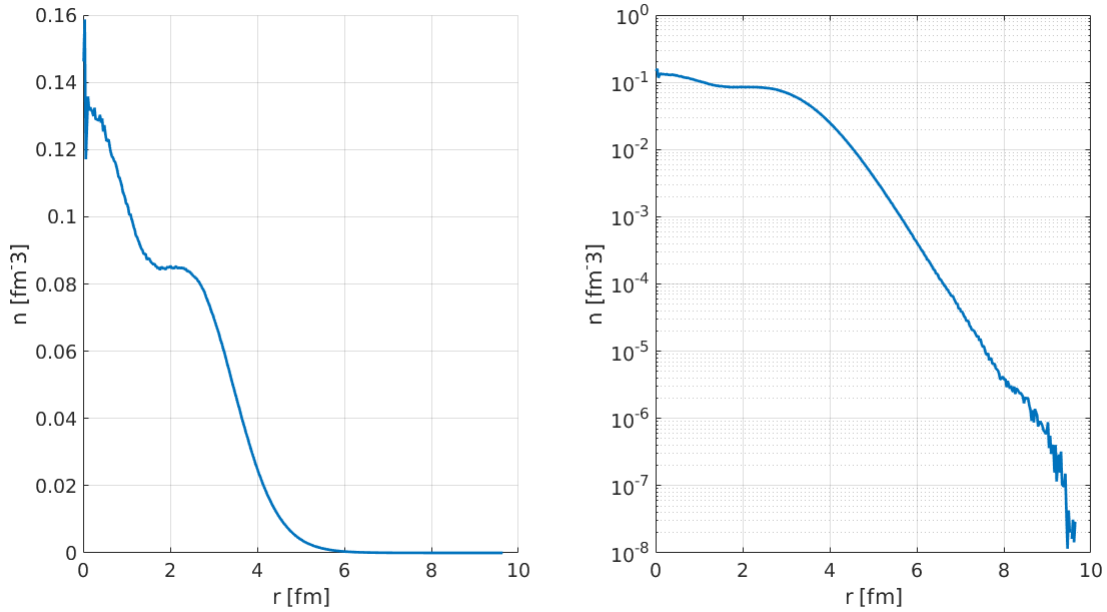


Figura 4.4: Densità neutronica del nucleo ^{40}Ca . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

Dalle figure 4.4 è possibile vedere come la densità in input sia, in un certo senso, rumorosa: se dal grafico in scala lineare della densità è possibile osservare forti oscillazioni nei suoi punti iniziali, dalla scala logaritmica si evince come questo comportamento sia presente anche sulla coda. Tale comportamento nella densità viene "trasferito" anche al potenziale che risulta fortemente essere discontinuo. Si può quindi dire che questa densità, così com'è, ha delle oscillazioni numeriche inaccettabili per l'algoritmo e che la rendono inutilizzabile. A riprova di questa affermazione viene riportato in figura 4.5 la porzione di potenziale da 0 a 5 fm ottenuto tramite il metodo di inversione e che ne evidenzia inconcludenza e scarso significato fisico.

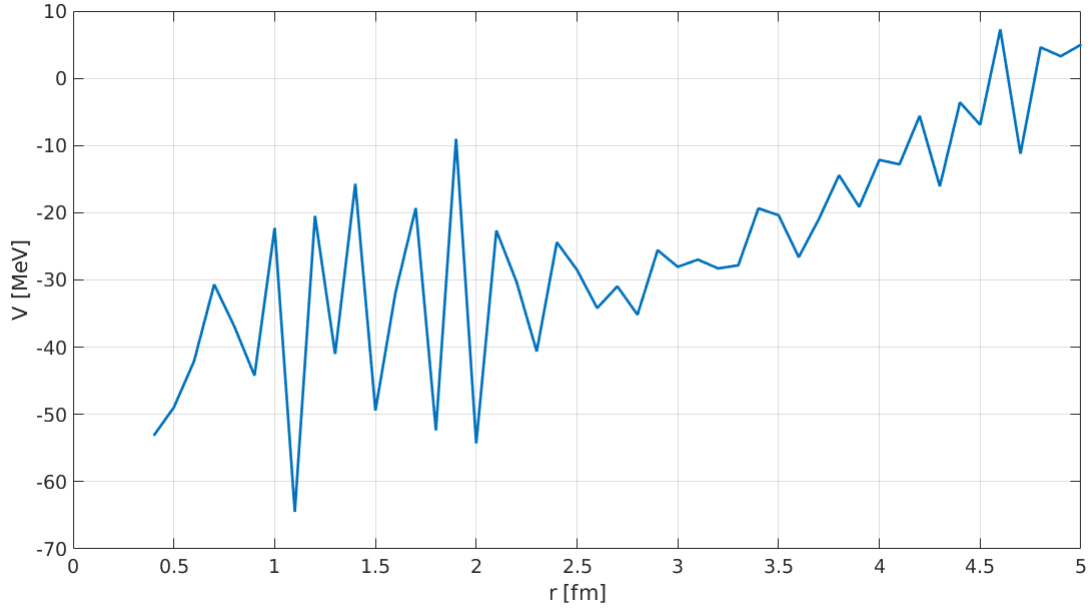


Figura 4.5: Ingrandimento dell'andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{40}Ca per $r \in [0; 5]$ fm.

Un primo tentativo di soluzione di questo problema può essere quello suggerito da [20]. Ovvero, si è scelto di eseguire uno *smooth* del logaritmo della densità tramite *cubic smoothing spline* [37]: una curva costituita da segmenti polinomiali di terzo grado che sono soggetti a particolari condizioni specifiche o di continuità ai loro punti di unione. Nello nostro caso è stato fatto uso dell'algoritmo presente all'interno dell'ambiente di calcolo MatLab che riceve in input, insieme ai dati, un parametro di smooth, $p \in [0; 1]$, che permette di regolarne l'intensità: per $p = 1$ non viene eseguito nessun lisciamiento della curva; per $p = 0$ l'algoritmo esegue il metodo dei minimi quadrati. Per via empirica, si è trovato come miglior valore per il parametro $p = 0.98$. La scelta di questo valore di p permette di eliminare il rumore sulla densità, rimanendo comunque vicini a quella di partenza, come visibile dai risultati mostrati in figura 4.6.

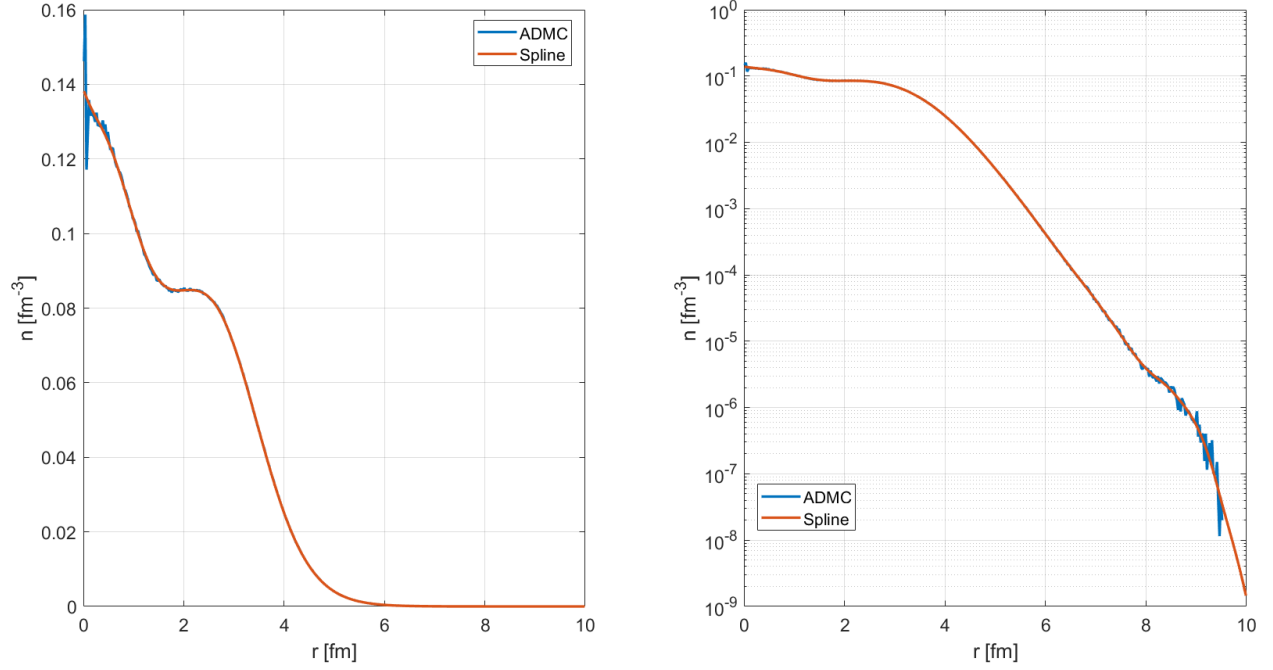


Figura 4.6: Densità neutronica del nucleo ^{40}Ca ottenuta tramite *cubic smoothing spline* con parametro di smooth $p = 0.98$ a confronto con la densità di partenza. A sinistra, si ha densità in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

Mediante l'implementazione di questo metodo è stato possibile ottenere un potenziale liscio, riportato in figura 4.7, ma che presenta delle problematicità dopo circa 6 fm. Tali oscillazioni tendono poi a peggiorare a circa 8 fm, regione nella quale la densità, come è possibile notare dalla figura 4.6 che riporta, sulla destra, l'andamento della densità in scala logaritmica, segue un andamento diverso da quello previsto di quasi linearità. In tale regione, infatti, per un potenziale a breve range ci si aspetterebbe che le code di funzione d'onda e densità abbiano un carattere di tipo esponenziale decrescente.

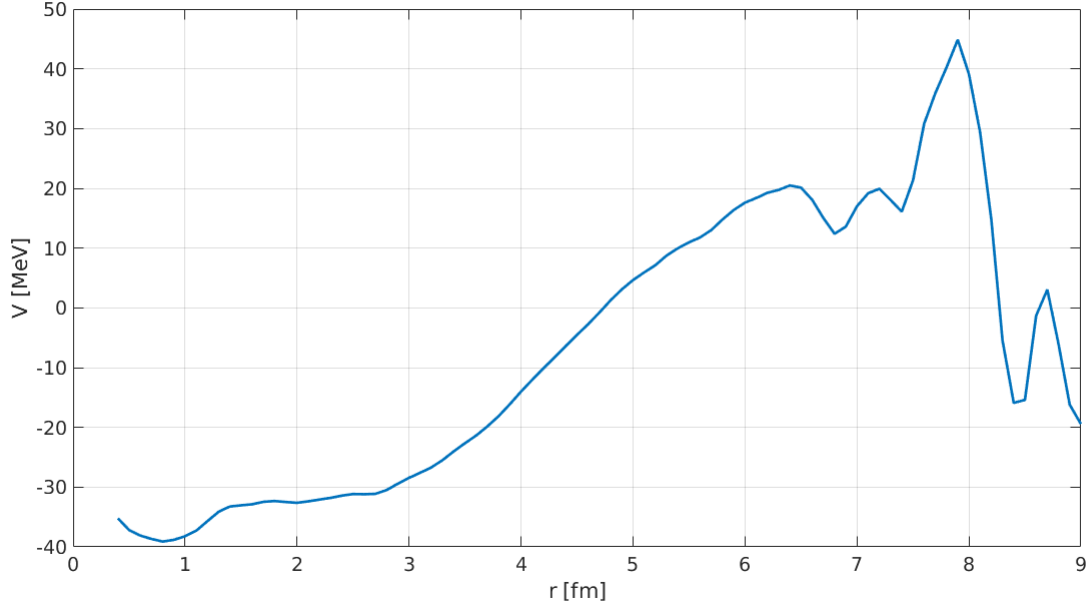


Figura 4.7: Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{40}Ca ottenuta interpolando la densità QMC mediante il metodo *cubic smoothing spline*.

Per ovviare a questo problema si è quindi scelto di eseguire un'interpolazione pesata sui dati utilizzando una somma di funzioni di Fermi a tre parametri. Il fit è stato eseguito tramite un tool apposito presente in MatLab, *Curve Fitting Toolbox* (cftool), in cui, oltre a definire la funzione interpolante, è possibile inserire il peso dei dati e scegliere il metodo con cui eseguire il fit: nella presente discussione si è optato per il metodo *Levenberg-Marquardt*.

La forma funzionale del fit, con la scelta del peso pari a $w = \frac{1}{\sigma^2}$, risulta essere

$$n(x) = \frac{c_0(1 + \frac{c_1 x^2}{c_2^2})}{1 + \exp\left(\frac{x - c_3}{c_4}\right)} + \frac{c_5(1 + \frac{c_6 x^2}{c_7^2})}{1 + \exp\left(\frac{x - c_8}{c_9}\right)} + \frac{c_{10}(1 + \frac{c_{11} x^2}{c_{12}^2})}{1 + \exp\left(\frac{x - c_{13}}{c_{14}}\right)} \quad (4.1)$$

$$\begin{array}{ccccc} c_0 = -0.2149 & c_1 = 0.9624 & c_2 = 0.2369 & c_3 = 3.669 & c_4 = 0.3415 \\ c_5 = 0.02624 & c_6 = -0.6874 & c_7 = 0.8276 & c_8 = 1.395 & c_9 = 0.3264 \\ c_{10} = 0.32174 & c_{11} = 0.5122 & c_{12} = 0.2115 & c_{13} = 3.669 & c_{14} = 0.3416 \end{array}$$

Insieme ai parametri, è stato calcolato anche χ^2 ridotto che risulta essere pari a 1.17, valutato su 381 punti che corrispondono alla lunghezza dell'intero vettore dati densità. In figura 4.8 è riportato l'esito di questa procedura ed è possibile osservare, particolarmente nel grafico in scala logaritmica, come la coda della densità, a differenza del caso precedente, segua un andamento apprezzabilmente lineare ed il potenziale ottenuto dell'inversione è riportato in figura 4.9.

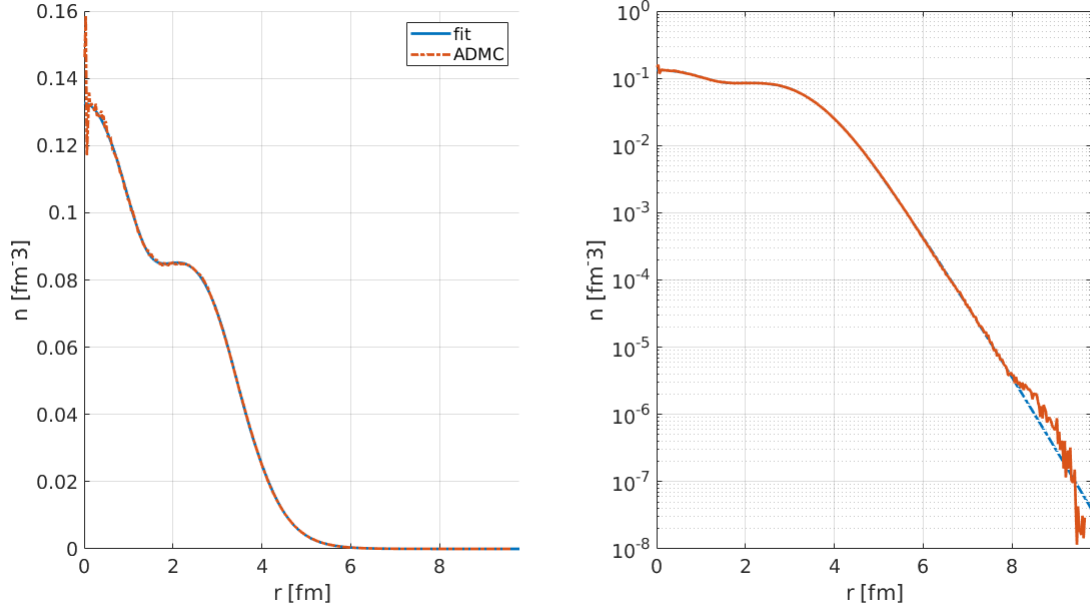


Figura 4.8: Confronto densità neutronica del nucleo ^{40}Ca di partenza ed interpolata. A sinistra, si la ha densità in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

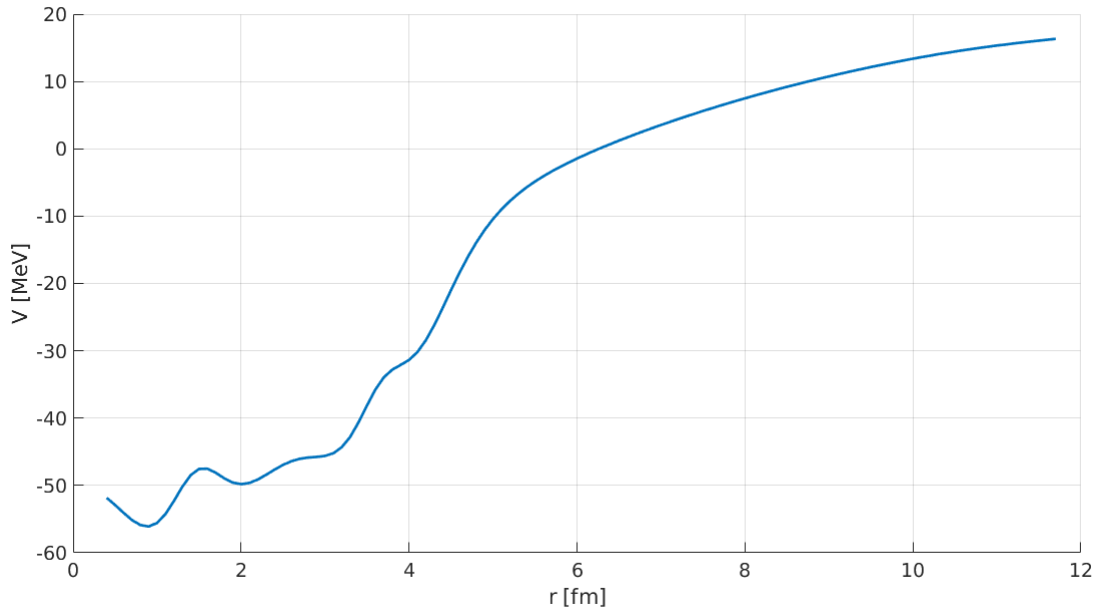


Figura 4.9: Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{40}Ca ottenuta dal fit.

È doveroso ricordare che il potenziale ricavato è definito a meno di una costante arbitraria. Per queste densità, si è sfruttata questa arbitrarietà per traslare il potenziale usando come costante additiva la somma, cambiata di segno, dell'energia dell'ultimo orbitale occupato e dell'energia di separazione sperimentale; in questo modo è stato possibile verificare che, dopo la traslazione, l'energia dell'ultimo livello occupato coincidesse con l'energia di separazione. Questo permette di

verificare il corretto andamento asintotico a grandi r del potenziale [34]. Affinché ciò accada è necessario che la densità presenti un corretto decadimento asintotico dato da

$$e^{-kr} \quad \text{dove} \quad k = 2\sqrt{\frac{2mS}{\hbar^2}} \quad (4.2)$$

dove k è la massa di protone o neutroni, assunte uguali in quanto si differenziano l'una dall'altra dello 0.1%, ed S è la relativa energia di separazione.

In scala logaritmica, o meglio per il logaritmo della densità, questo corrisponde ad avere una retta che presenta un coefficiente angolare proprio pari a k con unità di fm^{-1} .

Dalla figura 4.9 è possibile notare come il potenziale non presenti il corretto andamento asintotico. È stato quindi calcolato il coefficiente della retta ottenuta tramite fit, che risulta essere $k_{fit} = -2.65171 \text{ fm}^{-1}$, e confrontato con quello dato dall'energia di separazione neutronica sperimentale ($S_n^{exp} 15.634 \text{ MeV}$), pari a $k_{exp} = -1.73603 \text{ fm}^{-1}$. I due coefficienti presentano una discrepanza del 52.7% e questo porta a pensare che la densità sia da ritenere attendibile solo entro un certo intervallo.

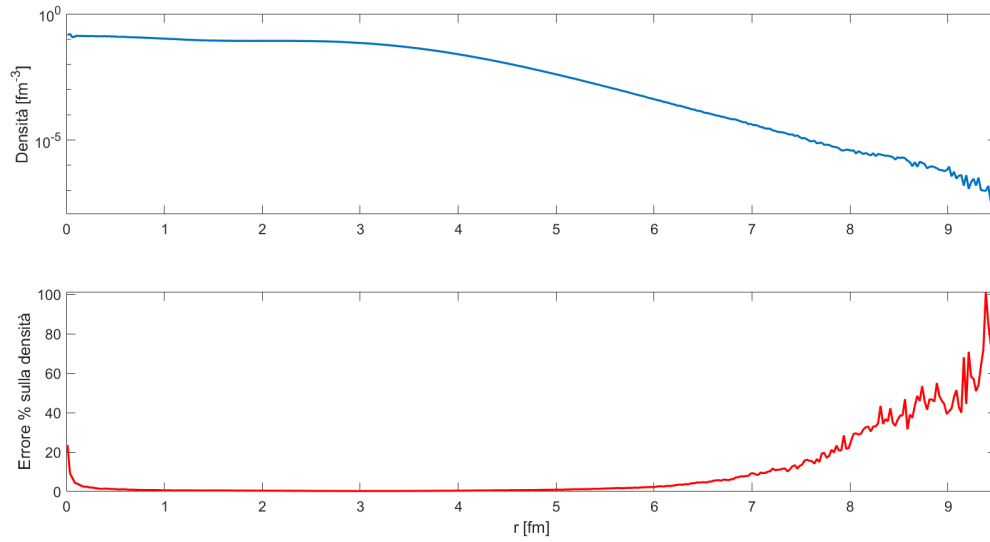


Figura 4.10: Andamento della densità neutronica di ^{40}Ca dal metodo QMC a confronto con il suo errore puntuale percentuale.

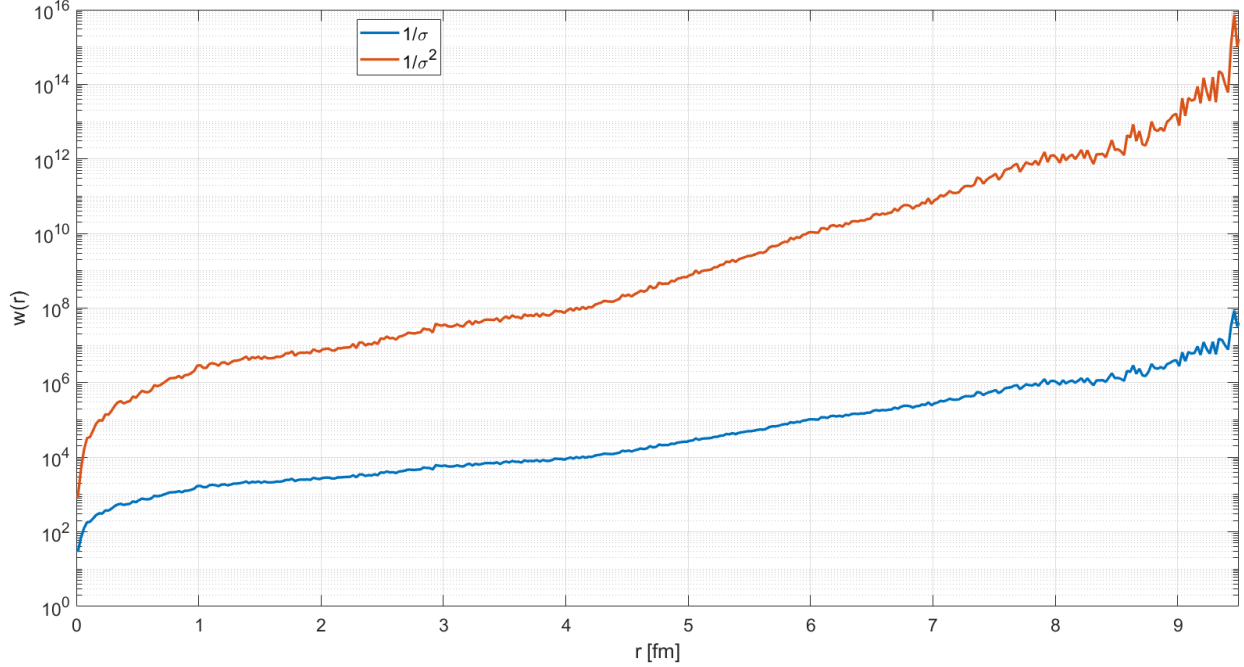


Figura 4.11: Andamento, in scala logaritmica, del peso per l'interpolazione rappresentato come inverso dell'errore puntuale (blu), o del suo quadrato (rosso), della densità di partenza.

Guardando la figura 4.10 si nota infatti come l'errore relativo sia inferiore al 5% fino ad $r = 6$ fm per poi crescere e tale comportamento si riflette sul fit: questo effetto può essere attribuito al fatto che con questa scelta dei pesi l'algoritmo darà grande importanza alla coda della densità. Al fine di svincolare lievemente, ma mantenendo comunque una buona interpolazione della densità di partenza, si è scelto di modificare il peso inserito nell'algoritmo come $w = \frac{1}{\sigma}$. Sebbene la precedente scelta del peso risulti più statisticamente corretta, in figura 4.11 è possibile confrontare le due scelte: la prima scelta del peso (rosso) ha un escursione di oltre 10 ordini di grandezza e dunque, la nuova scelta (blu), risulta essere meno vincolante nell'interpolazione della densità rispetto al centro. Si esegue quindi un nuovo fit con una nuova forma funzionale

$$\rho(x) = \frac{c_0(1 + \frac{c_1 x^2}{c_2})}{1 + \exp(\frac{x-c_3}{c_4})} + \frac{c_5(1 + \frac{c_6 x^2}{c_7}) + c_{10}(1 + \frac{c_{11} x^2}{c_{12}})}{1 + \exp(\frac{x-c_{13}}{c_{14}})} \quad (4.3)$$

$$\begin{array}{ccccc} c_0 = 0.07704 & c_1 = 0.03655 & c_2 = 1.014 & c_3 = 3.372 & c_4 = 0.4597 \\ c_5 = 0.05924 & c_6 = 0.1301 & c_7 = 0.4096 & c_{10} = 8.287 \cdot 10^{-8} & c_{11} = 0.2498 \\ & c_{12} = 0.01335 & c_{13} = 0.6905 & c_{14} = 0.2507 & \end{array}$$

A differenza del fit precedente, in questo caso si ottiene $\chi^2_{ridotto} = 49.30$, valutato su 381 punti che corrispondono alla lunghezza dell'intero vettore dati densità.

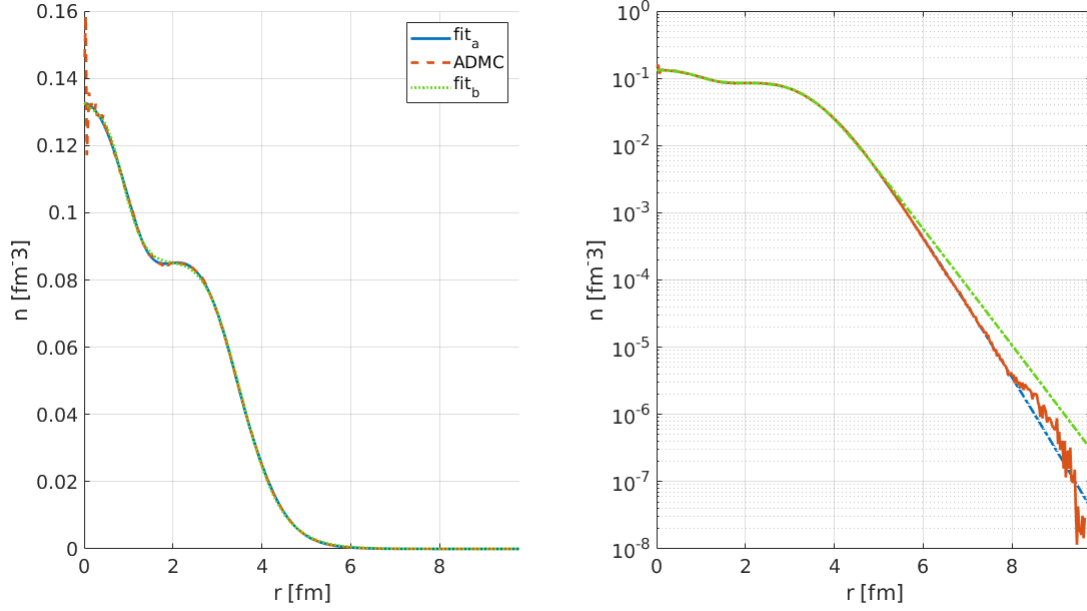


Figura 4.12: Confronto tra la densità neutronica del nucleo ^{40}Ca di partenza ed i due diversi fit. A sinistra, si ha la densità in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica

Dalla figura 4.12 si nota come il fit eseguito con dei pesi diversi (fit_b) abbia modificato il coefficiente angolare della coda della densità in scala logaritmica; valutando tale parametro si è ottenuto un valore pari a $k_b = -2.01012 \text{ fm}^{-1}$ che presenta una discrepanza del 15.7% rispetto a quello previsto. La bontà di tale scelta di forma funzionale e peso per il fit è avvalorata valutando il coefficiente angolare della densità ottenuta tramite Hartree-Fock, che ha un decadimento esponenziale con coefficiente pari a $k_{exp} = -2.096929 \text{ fm}^{-1}$, densità per cui il processo di inversione, ha mostrato il suo corretto andamento asintotico [1], confrontato con il tentativo precedente in figura 4.13.

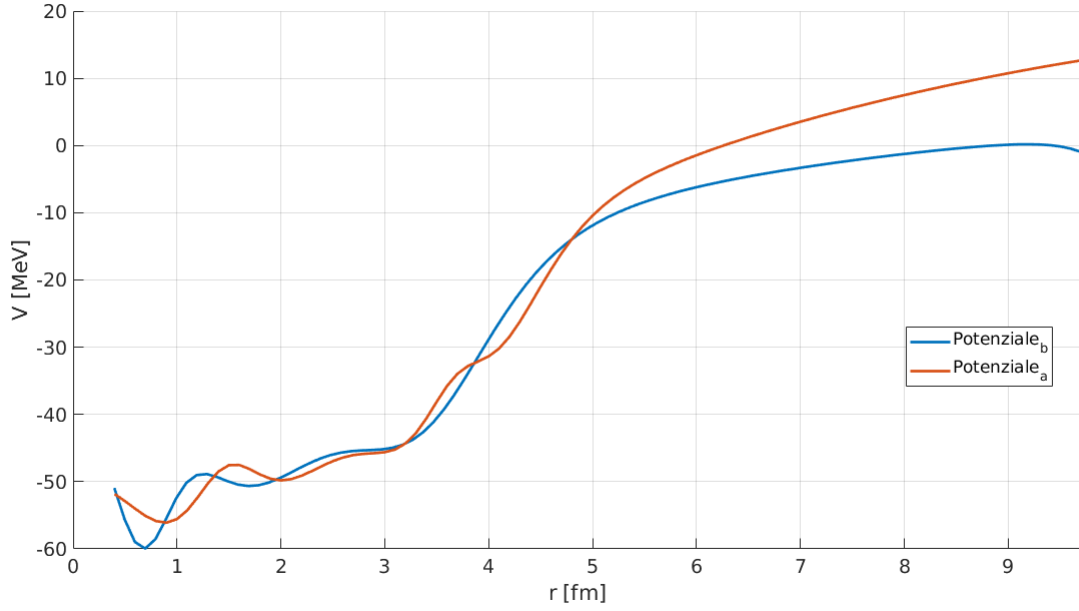


Figura 4.13: Confronto tra i potenziali relativi dalle densità neutroniche del nucleo $^{40}_{\text{Ca}}$ ottenute dai due fit.

Dal confronto in figura 4.12 tra i due potenziali è possibile notare come l'ipotesi iniziale di ritenere la densità attendibile solo in un certo intervallo sia verificata: nonostante le forme funzionali siano diverse e i test del $\chi^2_{ridotto}$ porterebbero a rigettare il secondo dei due fit, i potenziali presentano delle differenze dell'ordine di pochi MeV nella regione interna per poi crescere dopo i 6 fm, esattamente dove anche l'errore inizia ad aumentare. È possibile notare come siano presenti delle oscillazioni fino a 4 fm il potenziale ottenuto dal fit_a , fino a 3 fm per il fit_b il quale presenta una diffusività più accentuata.

4.1.2 ^{90}Zr

Lo Zirconio 90 è un nucleo composto da 40 protoni e 50 neutroni ed ha un raggio, secondo la definizione in (1.4), pari a $R = 5.3$ fm.

Le problematiche del rumore nella densità del Calcio è stata riscontrata anche per questo nucleo ed anche in questo caso si è scelto di eseguire un fit, sia per la densità dei neutroni che per quella dei protoni, con lo stesso procedimento descritto per il Calcio.

Neutroni

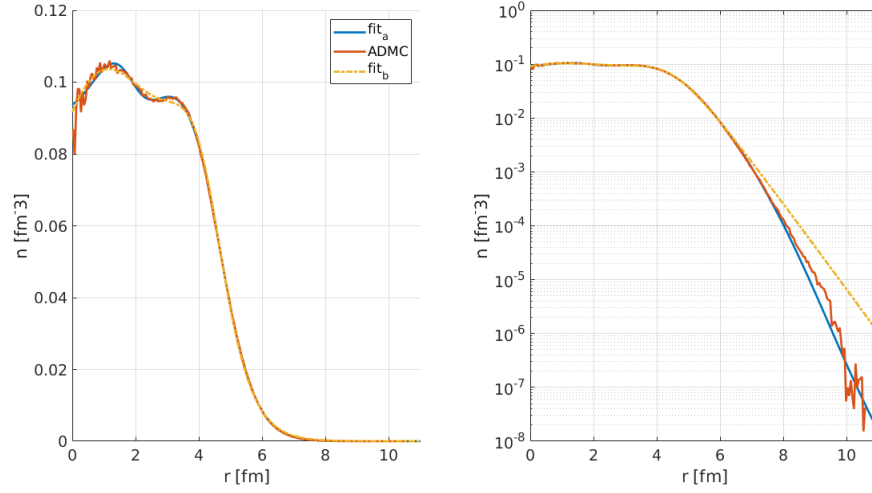


Figura 4.14: Confronto tra la densità neutronica del nucleo ^{90}Zr di partenza e quelle ottenute con i due diversi fit. A sinistra, si ha la densità in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

Le due forme funzionali ed i coefficienti ottenute per la densità neutronica dello ^{90}Zr sono rispettivamente per fit_a e fit_b

$$n_a(x) = a_1 \left\{ \exp \left[- \left(\frac{x - b_1}{d_1} \right)^2 \right] \right\} + \frac{c_0 \left(1 + \frac{c_1 x^2}{c_2^2} \right)}{1 + \exp \left(\frac{x - c_3}{c_4} \right)} + \frac{c_5 \left(1 + \frac{c_6 x^2}{c_7^2} \right)}{1 + \exp \left(\frac{x - c_8}{c_9} \right)} \quad (4.4)$$

$$\begin{array}{ccccc} c_0 = 0.0001954 & c_1 = 1.068 & c_2 = 0.3509 & c_3 = 4.548 & c_4 = 0.3903 \\ c_5 = 0.08918 & c_6 = 0.0001086 & c_7 = 0.9845 & c_8 = 1.866 & c_9 = 0.4103 \\ & a_1 = 0.07562 & b_1 = 3.086 & d_1 = 1.888 & \end{array}$$

con un $\chi_{ridotto}^2 = 3.53$, valutato su 212 punti, e

$$n_b(x) = a_1 \left\{ \exp \left[- \left(\frac{x - b_1}{d_1} \right)^2 \right] \right\} + \frac{c_0 \left(1 + \frac{c_1 x^2}{c_2^2} \right)}{1 + \exp \left(\frac{x - c_3}{c_4} \right)} \quad (4.5)$$

$$\begin{array}{ccccc} c_0 = 2.604 \cdot 10^{-05} & c_1 = 0.1835 & c_2 = 0.02741 & c_3 = 4.32 & \\ c_4 = 0.4936 & a_1 = 0.09872 & b_1 = 0.677 & d_1 = 2.484 & \end{array}$$

con un $\chi^2_{ridotto} = 881$, sempre valutato su 212 punti.

È stata inoltre calcolata l'energia di separazione neutronica sperimentale che risulta essere pari a 11.977 MeV ed anche in questo caso sono stati determinati i coefficienti angolari della retta che approssima la coda delle densità: per il fit_a si ha $k_a = -2.46799 \text{ fm}^{-1}$, per il fit_b si ha $k_b = -1.86624 \text{ fm}^{-1}$. Dall'energia di separazione si ricava invece un coefficiente angolare pari a $k_{exp} = -1.51949 \text{ fm}^{-1}$. Le discrepanze risultano essere 62.9% per il fit a e 22.82% per il fit_b . Dalla figura 4.15 ritroviamo lo stesso comportamento osservato per il Calcio mentre dalla figura 4.16 si osserva che i potenziali sono molti simili nella regione interna del nucleo, con differenze al più di pochi MeV ma che inizia a crescere dopo circa 6 fm. Anche in questo caso si notano le stesse caratteristiche osservate per il potenziale neutronico del Calcio viste prima in figura 4.12.

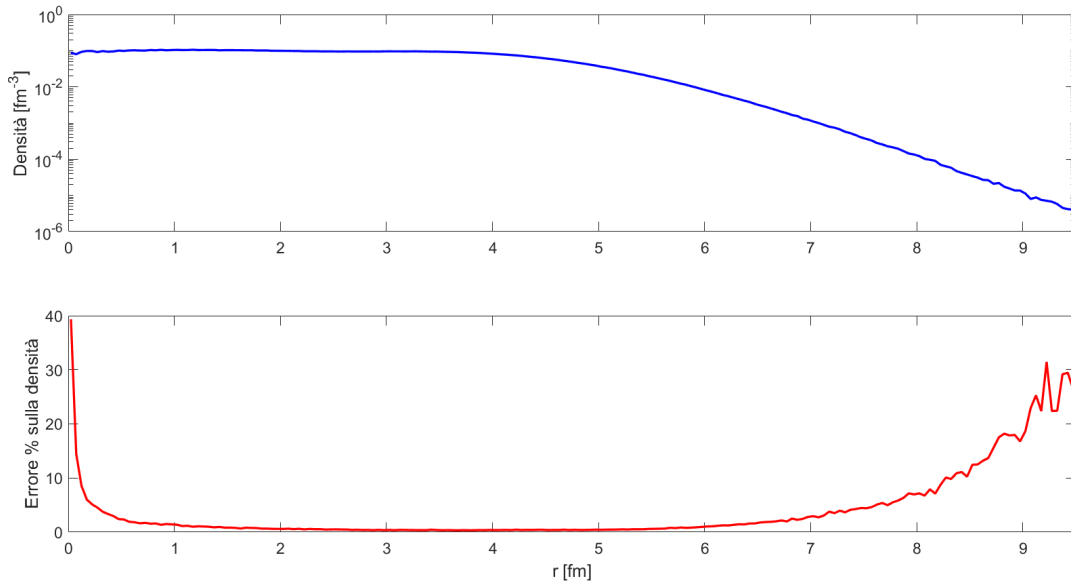


Figura 4.15: Andamento della densità neutronica di ^{90}Zr a confronto con l'errore puntuale percentuale.

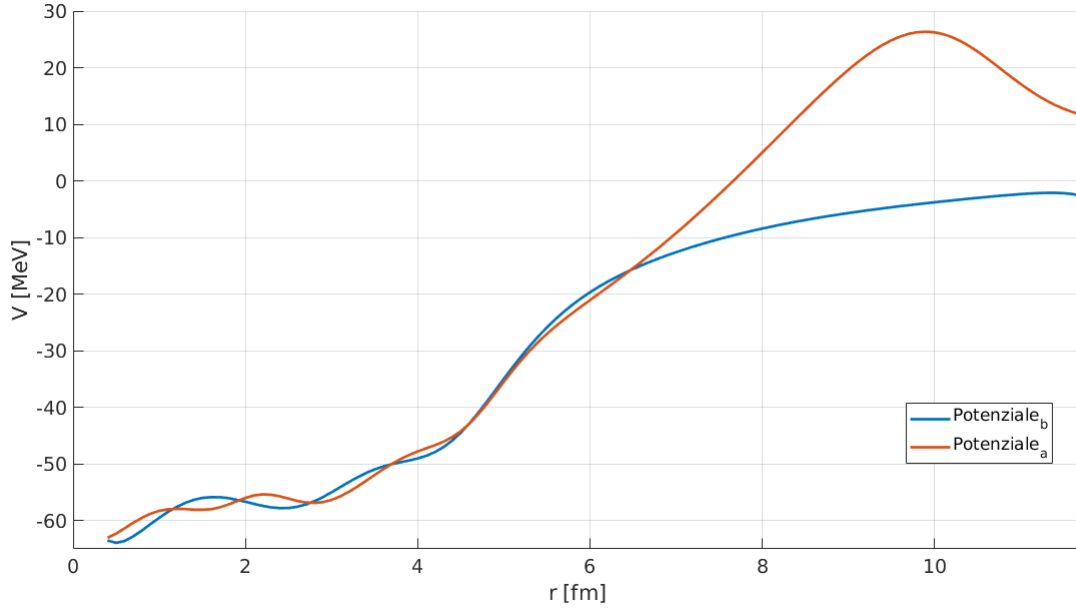


Figura 4.16: Confronto tra i potenziali relativi al nucleo ^{90}Zr per le densità neutroniche ottenute dai due fit.

Protoni

Le due forme funzionali ed i coefficienti ottenute per la densità neutronica dello ^{90}Zr sono rispettivamente per fit_a e fit_b

$$n_a(x) = a_1 \left\{ \exp \left[- \left(\frac{x - b_1}{d_1} \right)^2 \right] \right\} + \frac{c_0 \left(1 + \frac{c_1 x^2}{c_2^2} \right)}{1 + \exp \left(\frac{x - c_3}{c_4} \right)} + \frac{c_5 \left(1 + \frac{c_6 x^2}{c_7^2} \right)}{1 + \exp \left(\frac{x - c_8}{c_9} \right)} \quad (4.6)$$

$$\begin{array}{ccccc} c_0 = 0.1091 & c_1 = -0.2875 & c_2 = 0.701 & c_3 = 1.037 & c_4 = 0.5322 \\ c_5 = -0.0004299 & c_6 = 2.791 & c_7 = -0.5213 & c_8 = 3.242 & c_9 = 0.374 \\ a_1 = 0.09814 & b_1 = 3.07 & d_1 = 1.655 & & \end{array}$$

con un $\chi_{ridotto}^2 = 2.56$, valutato su 199 punti, e

$$n_b(x) = \frac{c_0 \left(1 + \frac{c_1 x^2}{c_2^2} \right)}{1 + \exp \left(\frac{x - c_3}{c_4} \right)} + \frac{c_5}{1 + \exp \left(\frac{x - c_6}{c_7} \right)} \quad (4.7)$$

$$\begin{array}{ccccc} c_0 = 0.004397 & c_1 = 0.7244 & c_2 = 0.4092 & c_3 = 1.136 \\ c_4 = 0.3826 & c_5 = 0.09126 & c_6 = 4.516 & c_7 = 0.4951 \end{array}$$

con un $\chi_{ridotto}^2 = 4.63 \cdot 10^3$, sempre valutato su 199 punti.

In questo caso il potenziale, di cui il confronto tra i due fit è riportato in figura 4.19, dovrebbe saldarsi con continuità alla barriera Coulombiana e poi andare a zero, per far sì che si abbia questo andamento è necessario includere un contributo di Coulomb nell'esponenziale. Il fit_b non presenta tale termine e, per quanto mostri un miglioramento sulla coda, risulta essere non sufficiente per poter verificare il corretto andamento.

In questo caso l'energia di separazione protonica sperimentale risulta essere $S_p^{exp} = 7.84432$ MeV portando quindi a un coefficiente angolare previsto di $k_{exp} = -1.22970$ fm⁻¹; il coefficiente del fit_a risulta essere pari a $k_a = -2.45716$, mentre quello del fit_b risulta $k_b = -2.17978$ fm⁻¹ con una discrepanza del 99.9% e del 77.2%.

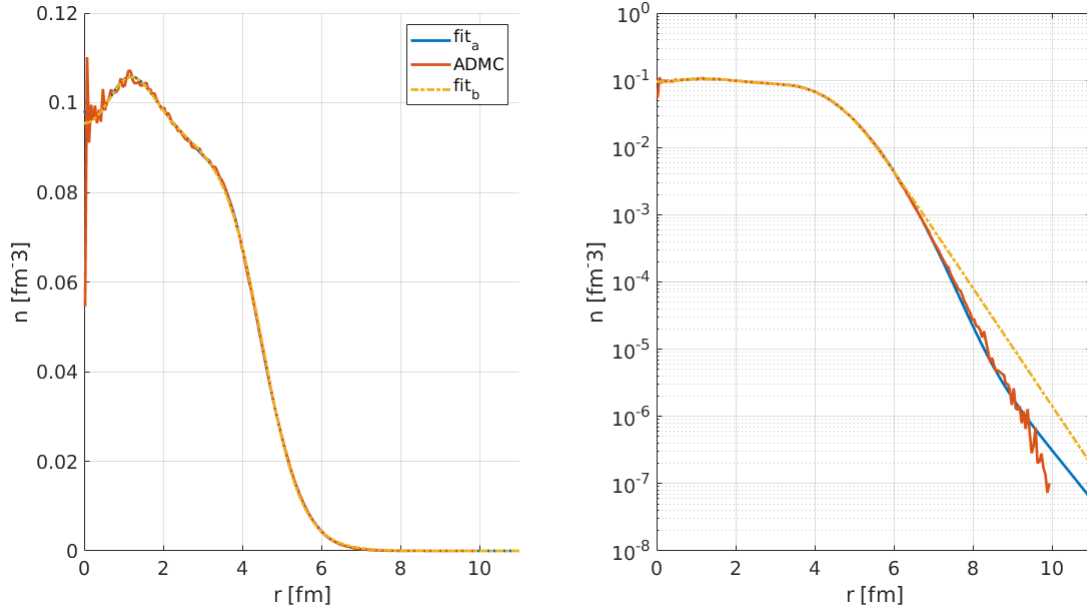


Figura 4.17: Confronto tra la densità protonica del nucleo ^{90}Zr di partenza con quelle ottenute dai due diversi fit. A sinistra, si ha la densità in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica

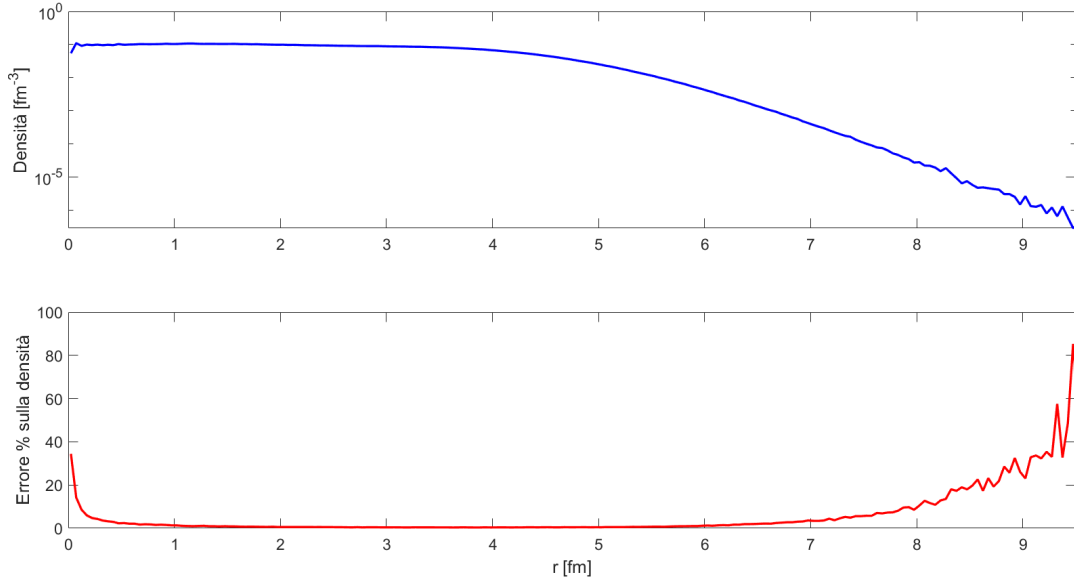


Figura 4.18: Andamento della densità protonica di ^{90}Zr a confronto con l'errore puntuale percentuale.

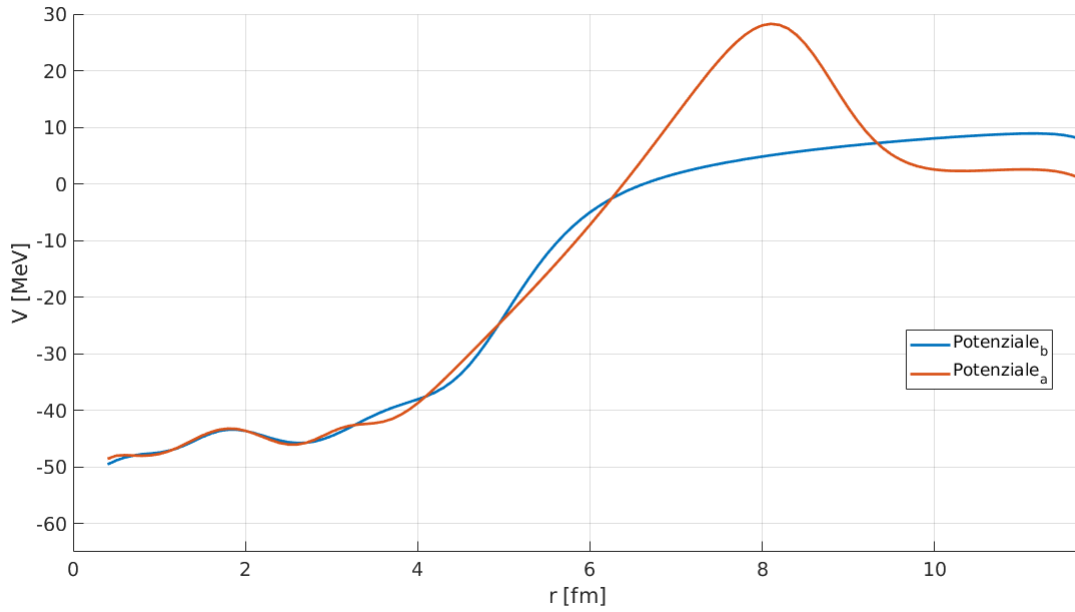


Figura 4.19: Confronto tra i potenziali relativi al nucleo ^{90}Zr per le densità protoniche ottenute dai due fit

Dalla figura 4.19 è possibile notare come il potenziale ottenuto dalla densità del fit_a abbia un picco a circa 8 fm che potrebbe suggerire un corretto saldamento alla barriera Coulombiana, tuttavia questa dovrebbe essere più bassa, circa 10 MeV. La figura 4.20 mostra un confronto con i potenziali ricavati dalle due densità, entrambi dopo aver eseguito i fit_b , l'intervallo considerato

è solo quello della parte interna. È possibile notare come il potenziale dei neutroni risulti essere molto più profondo rispetto a quello dei protoni; i due potenziali differiscono di circa 10 MeV che risulterebbe essere la somma dell'energia Coulombiana e del termine di asimmetria, ma poiché il termine Coulombiano stimato coinciderebbe con questa differenza, siamo indotti a pensare che il termine di asimmetria sia pressoché trascurabile.

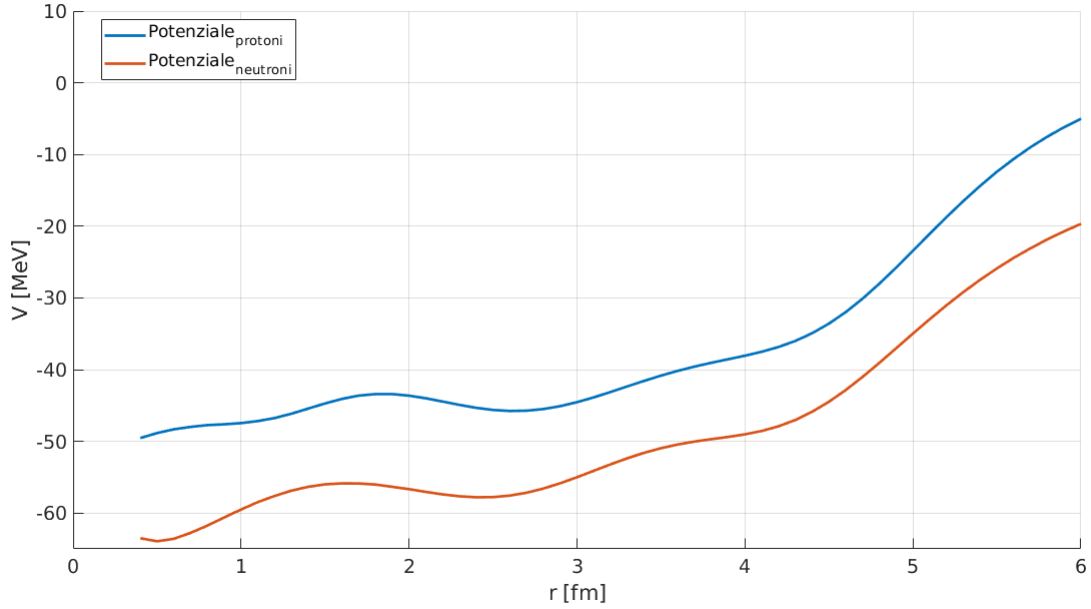


Figura 4.20: Confronto tra i potenziali relativi al nucleo ^{90}Zr per la densità protonica (blu) e neutronica (rosso) nell'intervallo $r \in [0; 6]$.

4.2 SCGF

Le densità presentate in questa sezione sono ottenute tramite un'interazione chirale: le $NNLO_{sat}$ [10] che, come le altre interazioni della stessa famiglia, include forze a due e tre nucleoni basate sulla teoria chirale efficace. A differenza delle altre ha la peculiarità che, insieme alle forze, ottimizza simultaneamente alcune osservabili e proprietà di certi nuclei leggeri, come carbonio e isotopi dell'ossigeno, come energia di legame e raggi di carica.

A differenza di quanto esposto nella precedente sezione, i calcoli SCGF sono fatti su di una base di oscillatore armonico in uno spazio a momento angolare massimo $l_{max} = 13$ ed un numero di eccitazioni al di sopra della configurazione di Pauli più bassa possibile $N_{max} = 150$. Per poter ricavare un potenziale nucleare e partire da densità $NNLO_{sat}$, non è necessario agire sulle stesse con processi di interpolazione al fine di eliminare rumori o oscillazioni indesiderate. In questo caso, le densità vengono date in input al programma così come sono.

I potenziali così ricavati vengono shiftati verticalmente in maniera tale da far sì che questi abbiano valore nullo per grandi distanze. Nel nostro caso, dopo aver osservato il loro caratteri per i diversi nuclei utilizzati, abbiamo imposto un fattore di traslazione tale per cui il potenziale valesse zero esattamente in $r = 12$ fm.

L'energia totale dei vari nuclei è stata calcolata sommando le energie dei vari livelli e calcolando, tramite metodo dei trapezi, l'integrale

$$E_{tot} = \sum_j \lambda_j + E_{xc}[n(\mathbf{r})] - \int_a^b d^3r \left[\frac{1}{2} V_{ks}(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \right] n(\mathbf{r})$$

Usando l'equazione (2.26) e, poiché stiamo considerando un caso in assenza di potenziale di esterno e scambio-correlazione, il calcolo si riduce a

$$E_{tot} = \sum_j \lambda_j - \int_a^b d^3r \frac{1}{2} V_{ks} n(r) \quad (4.8)$$

dove i λ_j sono gli autovalori. Vengono ora presentati in maniera sistematica, e successivamente commentati, i grafici delle densità e dei relativi potenziali per ciascuno dei nuclei studiati. Insieme ad essi, vengono anche riportati i valori delle energie di ogni orbitale occupato λ_j , l'energia totale del sistema, calcolata come in equazione 4.8, e l'energia di separazione sperimentale, calcolata come in equazione 1.3.

4.2.1 ^{16}O

Neutroni

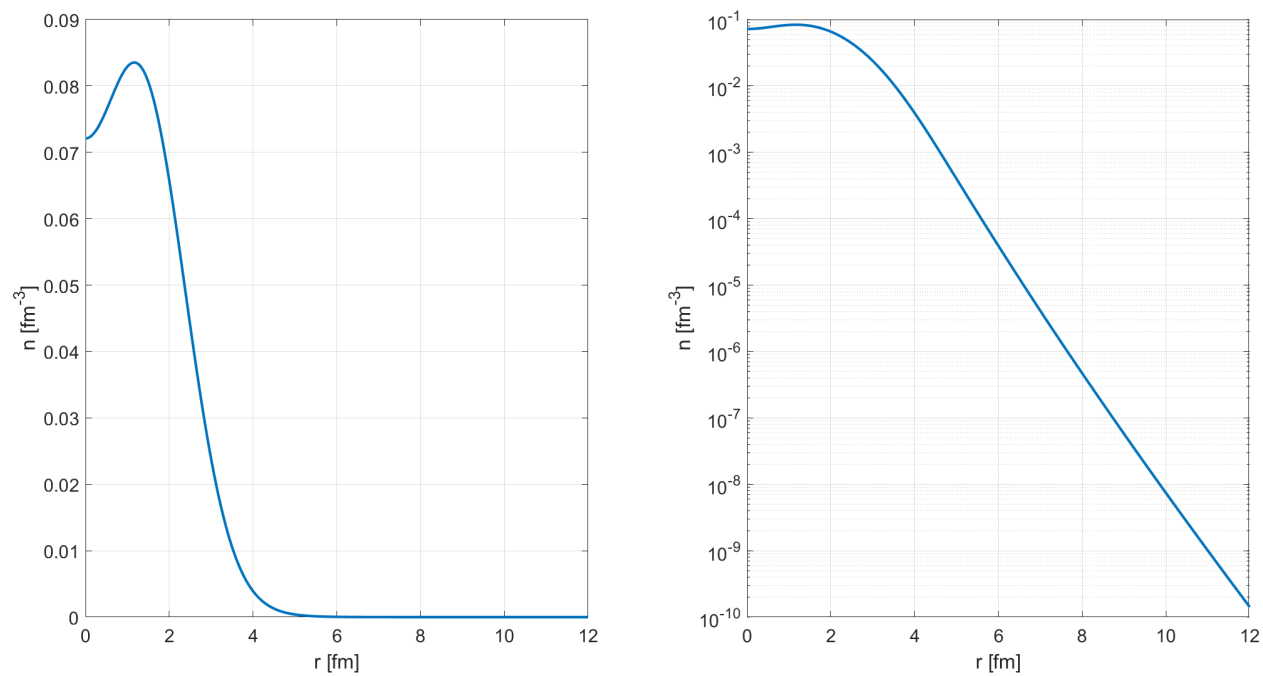


Figura 4.21: Densità neutronica del nucleo ^{16}O . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

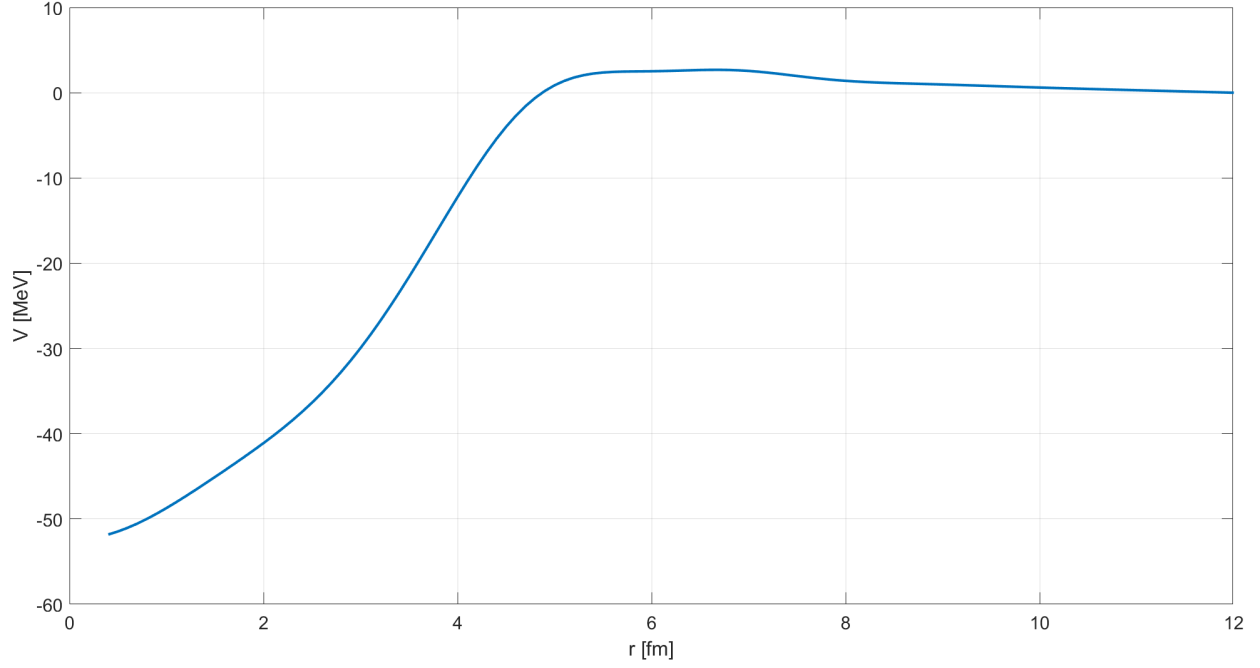


Figura 4.22: Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{16}O .

Orbitale	Energia [MeV]
1s	-30.1542
1p	-16.3276

Tabella 4.1: Energia relativa agli orbitali.

Il potenziale è stato traslato di -16.023 MeV. L'energia di separazione sperimentale risulta essere $S_n^{exp} = 15.6725$ MeV, a fronte di quella teorica $S_n^{teo} = 14.3325$ MeV, e confrontando tale valore con l'energia dell'ultimo orbitale occupato si ha una differenza di 0.6551 MeV o del 4%.

È stato estrapolato il coefficiente angolare della coda del logaritmo della densità che risulta essere pari a $k = -1.8999 \text{ fm}^{-1}$, mentre quello dato dall'energia di separazione sperimentale è $k_{exp} = -1.7382 \text{ fm}^{-1}$.

Protoni

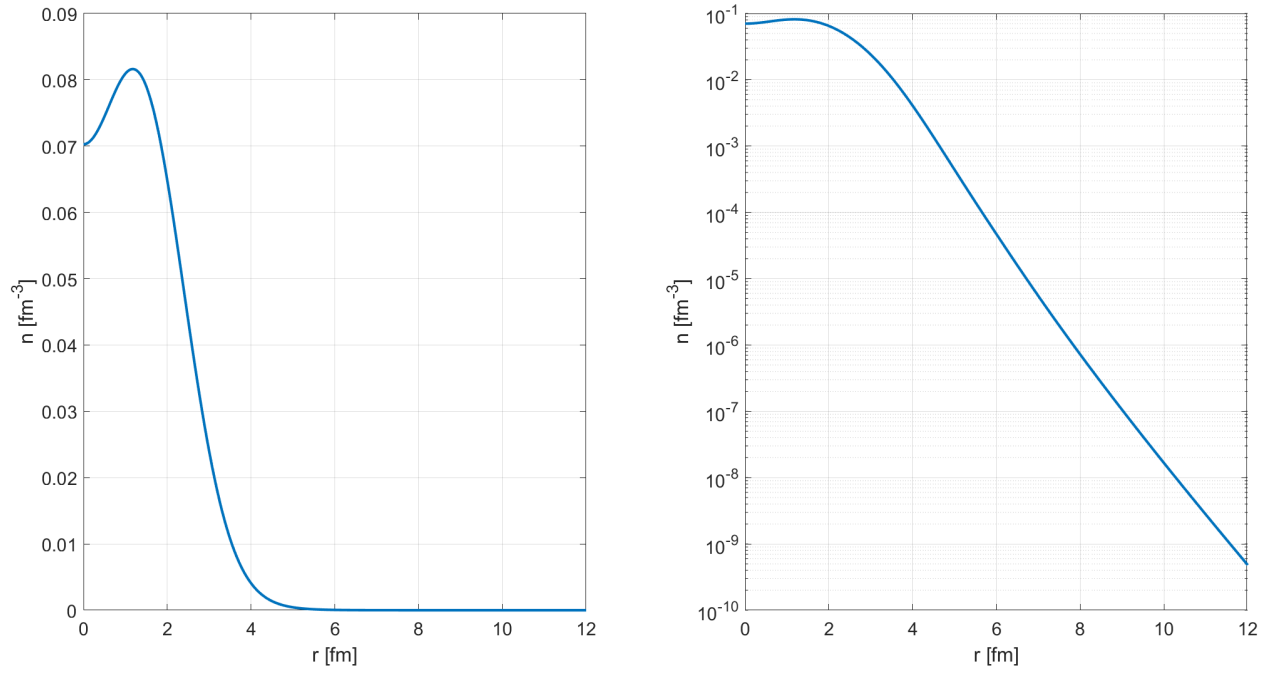


Figura 4.23: Densità protonica del nucleo ^{16}O . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

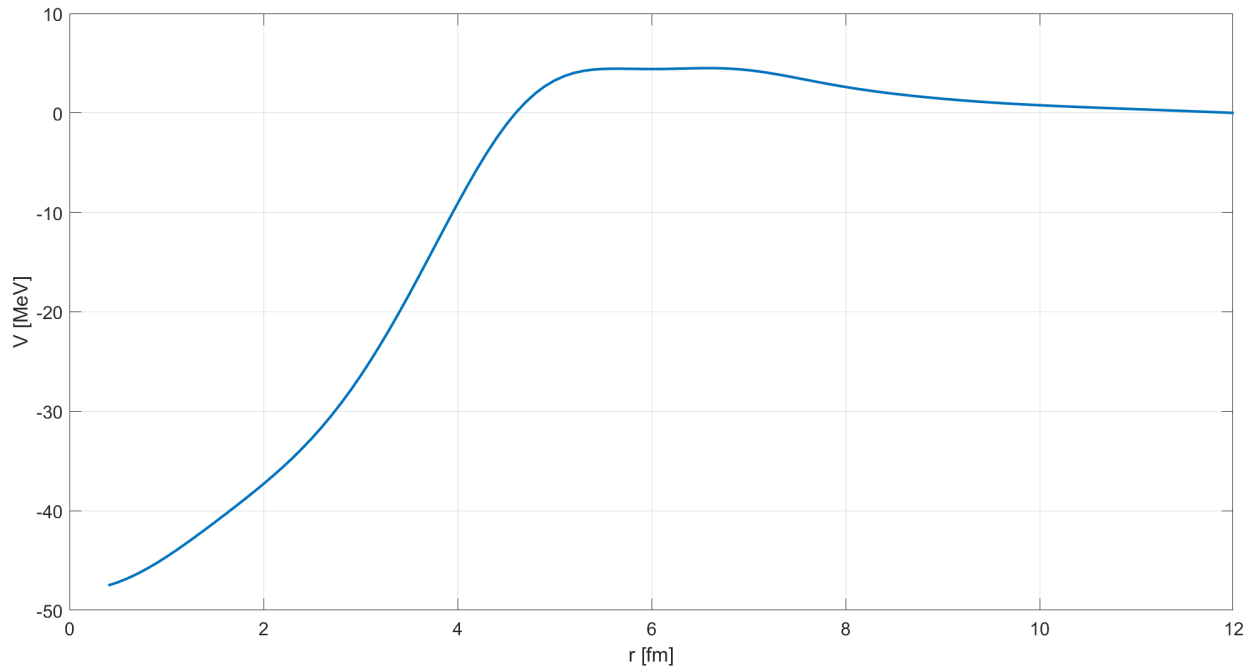


Figura 4.24: Andamento del potenziale per la densità protonica del nucleo ^{16}O .

Orbitale	Energia [MeV]
1s	-26.3376
1p	-12.7299

Tabella 4.2: Energia relativa agli orbitali.

Il potenziale è stato traslato di -12.4326 MeV. L'energia di separazione sperimentale risulta essere $S_p^{exp} = 11.6184$ MeV, a fronte di quella teorica $S_p^{teo} = 11.1286$ MeV, e confrontando tale valore con l'energia dell'ultimo orbitale occupato si ha una differenza di 1.1115 MeV o dell' 8.7% . È stato estrapolato il coefficiente angolare della coda del logaritmo della densità che risulta essere pari a $k = -1.6941$ fm $^{-1}$, mentre quello dato dall'energia di separazione sperimentale è $k_{exp} = -1.4966$ fm $^{-1}$.

Il nucleo risulta quindi avere un'energia totale di $E_{tot}^{exp} = 174.5065$ MeV, a fronte di una teorica $E_{tot}^{teo} = 126.2940$ MeV.

4.2.2 ^{24}O

Neutroni

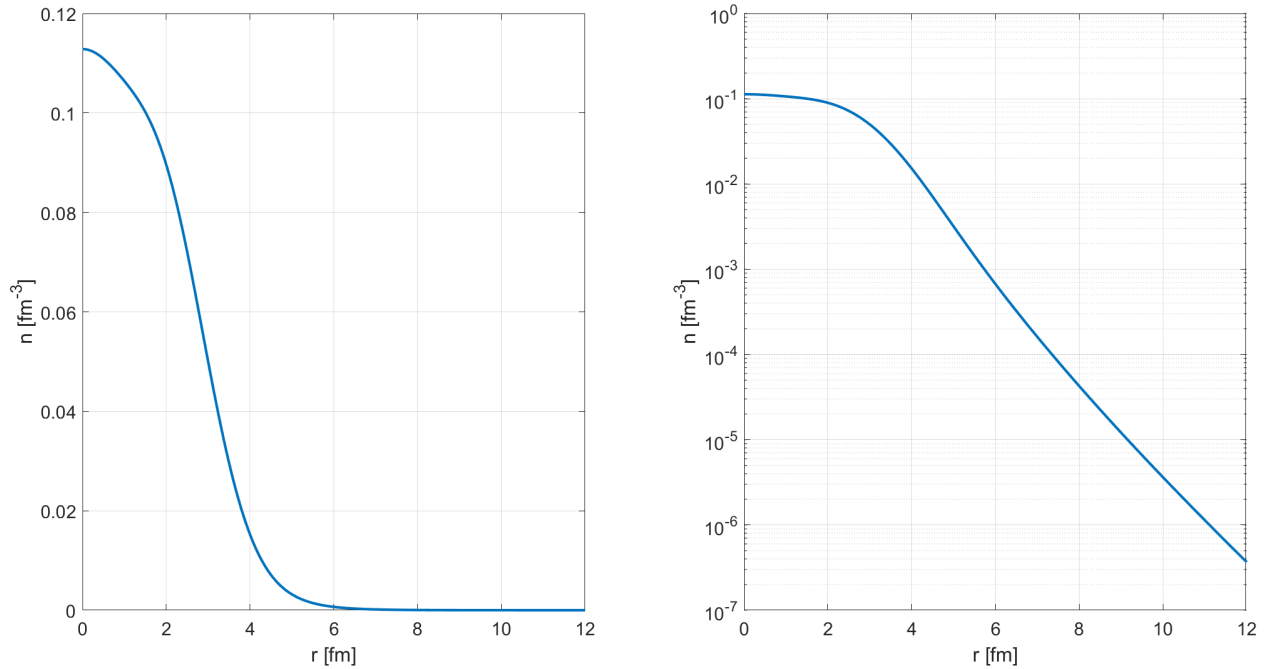


Figura 4.25: Densità neutronica del nucleo ^{24}O . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

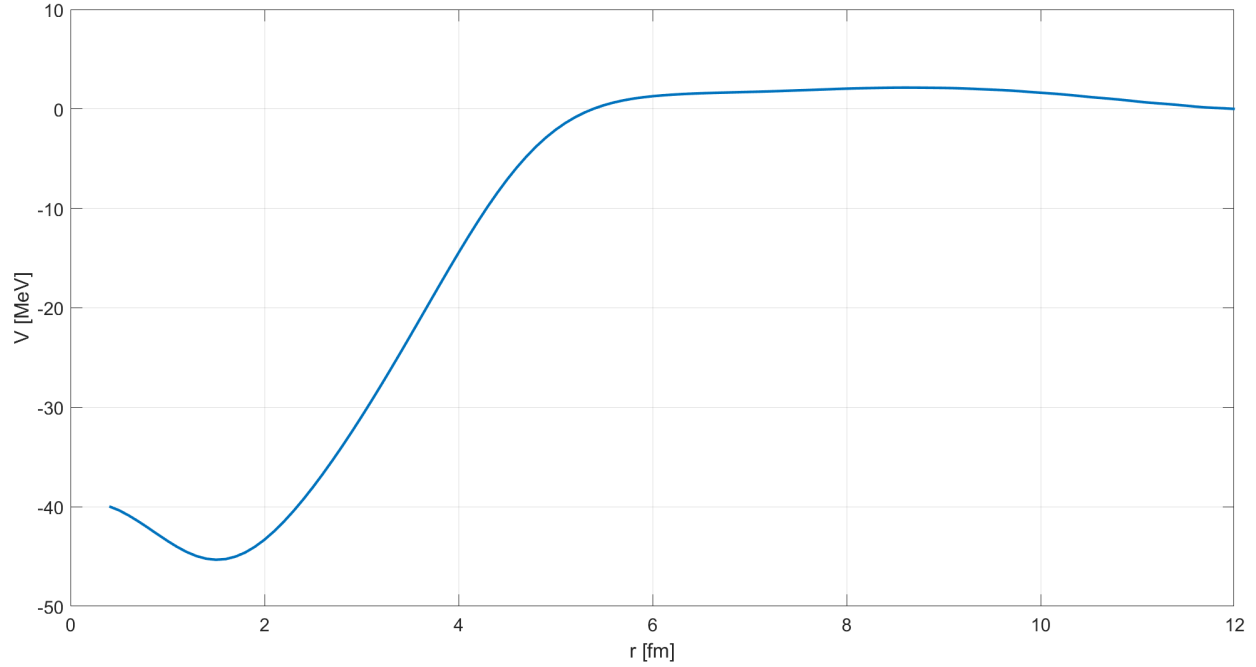


Figura 4.26: Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{24}O .

Orbitale	Energia [MeV]
1s	-29.8856
1p	-17.5564
1d	-4.5765
2s	-3.7759

Tabella 4.3: Energia relativa agli orbitali.

Il potenziale è stato traslato di -4.8537 MeV. L'energia di separazione sperimentale risulta essere $S_n^{exp} = 4.2484$ MeV, a fronte di quella teorica $S_n^{teo} = 3.9770$ MeV, e confrontando tale valore con l'energia dell'ultimo orbitale occupato si ha una differenza di 0.4725 MeV o del 12.5% .

È stato estrapolato il coefficiente angolare della coda del logaritmo della densità che risulta essere pari a $k = -1.0853 \text{ fm}^{-1}$, mentre quello dato dall'energia di separazione sperimentale è $k_{exp} = -0.9050 \text{ fm}^{-1}$.

Protoni

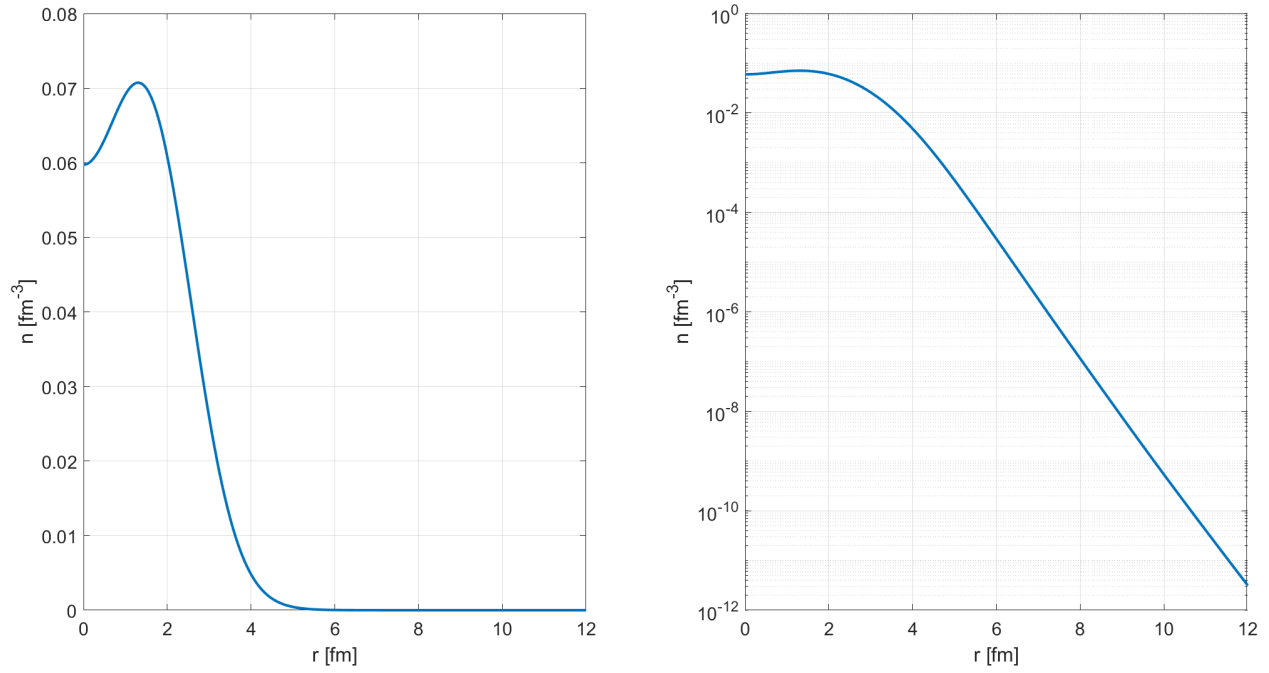


Figura 4.27: Densità protonica del nucleo ^{24}O . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

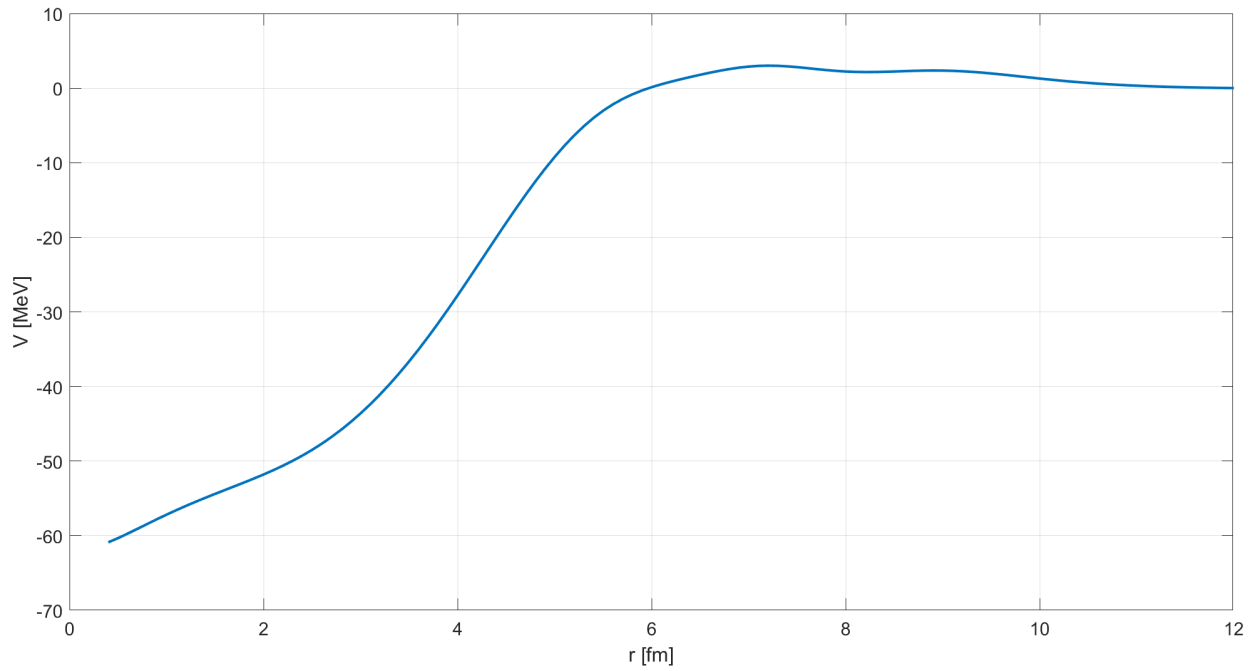


Figura 4.28: Andamento del potenziale per la densità protonica del nucleo ^{24}O .

Orbitale	Energia [MeV]
1s	-40.9897
1p	-28.6368

Tabella 4.4: Energia relativa agli orbitali.

Il potenziale è stato traslato di -28.3698 MeV. L'energia di separazione sperimentale risulta essere $S_p^{exp} = 26.6560$ MeV, a fronte di quella teorica $S_p^{teo} = 25.8842$ MeV, e confrontando tale valore con l'energia dell'ultimo orbitale occupato si ha una differenza di 1.9808 MeV o del 7.4% . È stato estrapolato il coefficiente angolare della coda del logaritmo della densità che risulta essere pari a $k = -2.4878$ fm $^{-1}$, mentre quello dato dall'energia di separazione sperimentale è $k_{exp} = -2.2668$ fm $^{-1}$.

Il nucleo risulta quindi avere un'energia totale di $E_{tot}^{exp} = 292.2235$ MeV, a fronte di una teorica $E_{tot}^{teo} = 171.497$ MeV.

4.2.3 ^{34}Si

Neutroni

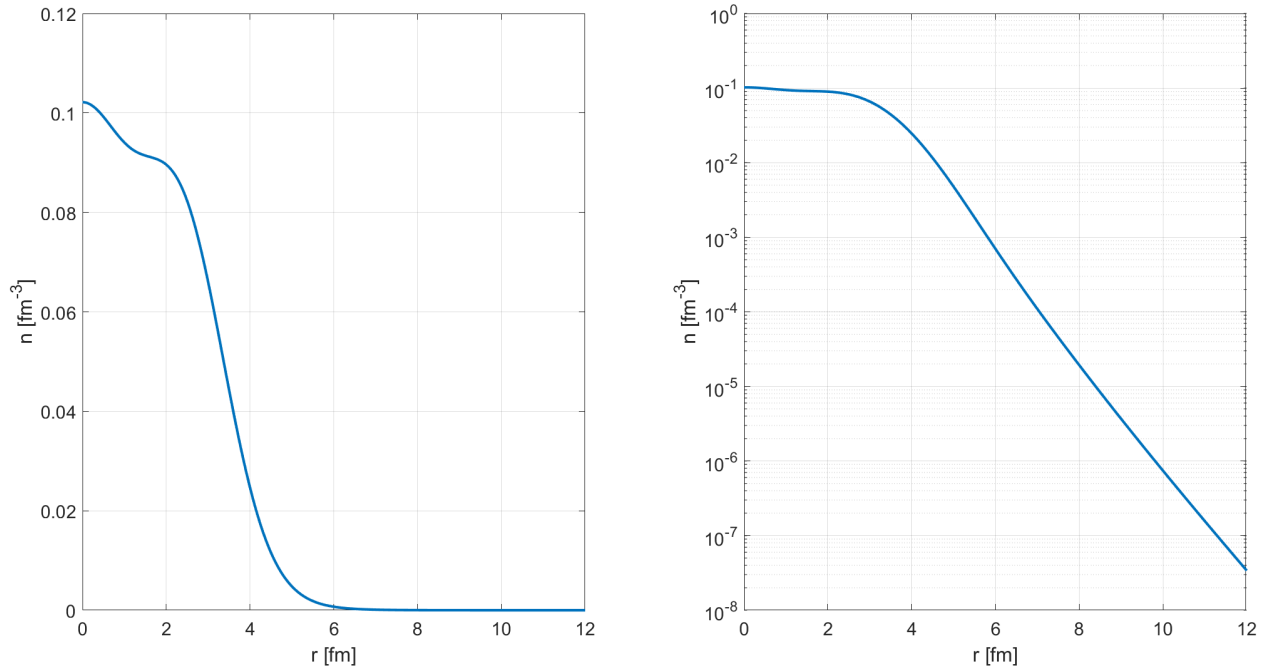


Figura 4.29: Densità neutronica del nucleo ^{34}Si . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

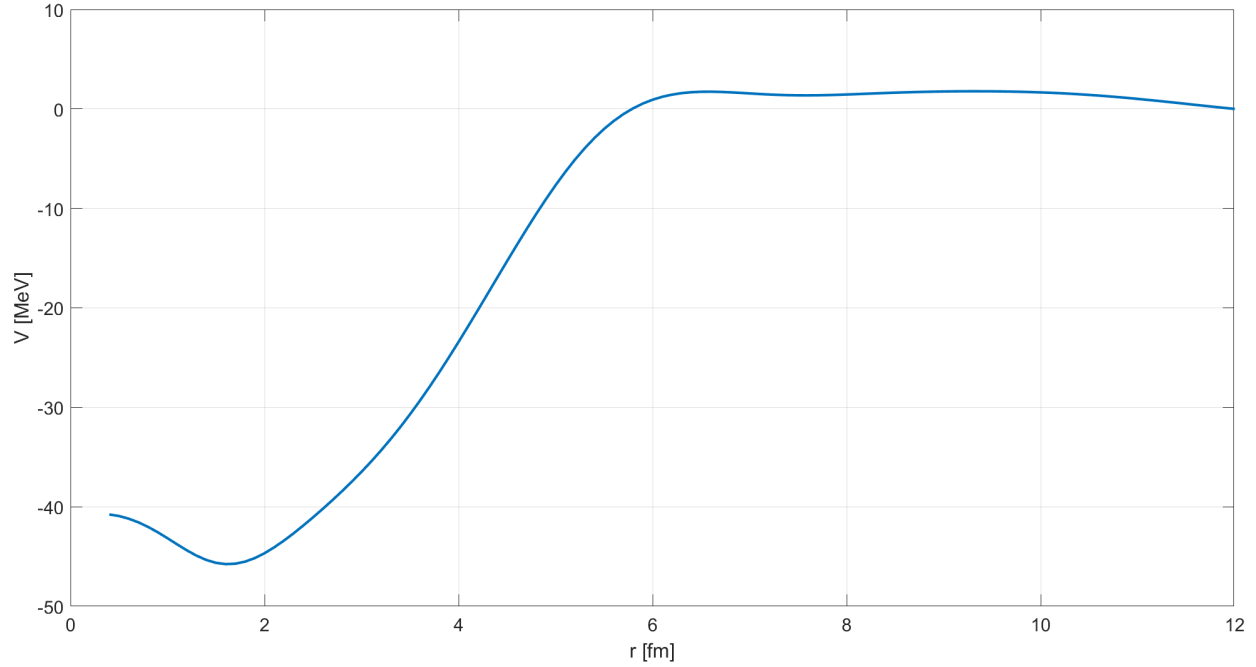


Figura 4.30: Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{34}Si .

Orbitale	Energia [MeV]
1s	-32.3323
1p	-21.7115
1d	-10.1622
2s	-8.6627

Tabella 4.5: Energia relativa agli orbitali.

Il potenziale è stato traslato di -9.4017 MeV. L'energia di separazione sperimentale risulta essere $S_n^{exp} = 7.5220$ MeV, a fronte di quella teorica $S_n^{teo} = 7.9077$ MeV, e confrontando tale valore con l'energia dell'ultimo orbitale occupato si ha una differenza di 1.1407 MeV o del 15.2% .

È stato estrapolato il coefficiente angolare della coda del logaritmo della densità che risulta essere pari a $k = -1.4770 \text{ fm}^{-1}$, mentre quello dato dall'energia di separazione sperimentale è $k_{exp} = -1.2042 \text{ fm}^{-1}$.

Protoni

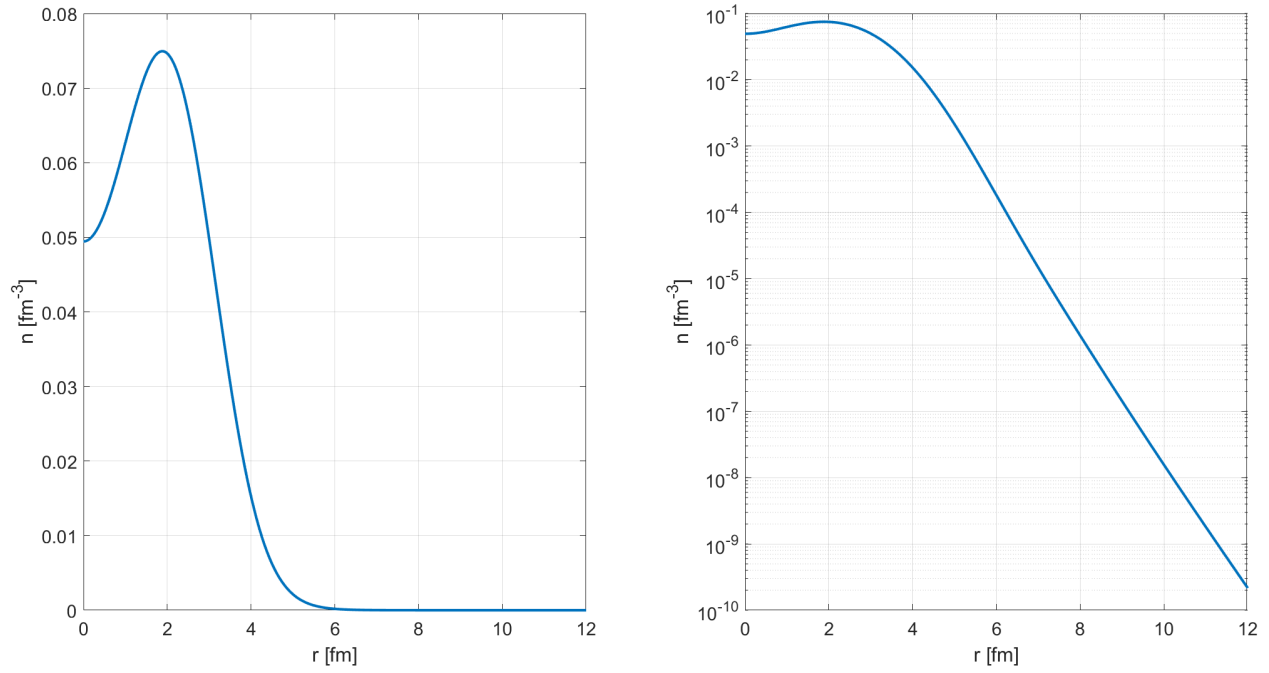


Figura 4.31: Densità protonica del nucleo ^{34}Si . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

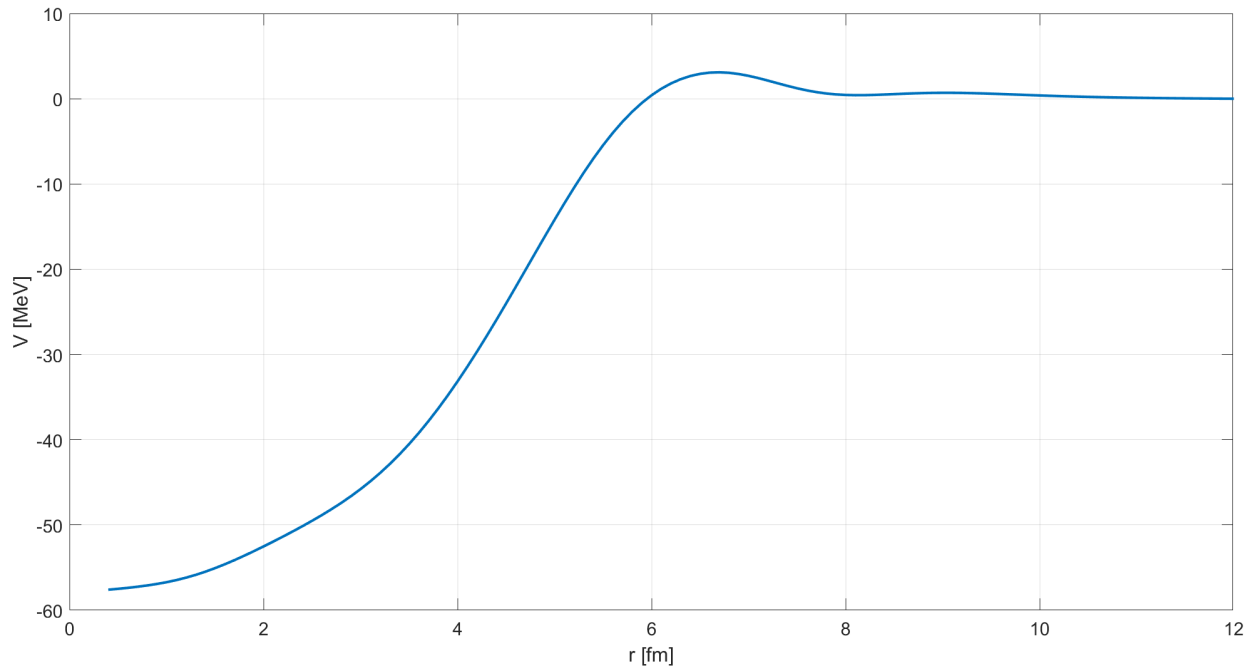


Figura 4.32: Andamento del potenziale per la densità protonica del nucleo ^{34}Si .

Orbitale	Energia [MeV]
1s	-41.9710
1p	-30.7212
1d	-19.0354

Tabella 4.6: Energia relativa agli orbitali.

Il potenziale è stato traslato di -30.3994 MeV. L'energia di separazione sperimentale risulta essere $S_p^{exp} = 18.26806$ MeV, a fronte di quella teorica $S_p^{teo} = 17.8904$ MeV, e confrontando tale valore con l'energia dell'ultimo orbitale occupato si ha una differenza di 0.3468 MeV o del 1.9% . È stato estrapolato il coefficiente angolare della coda del logaritmo della densità che risulta essere pari a $k = -2.0712 \text{ fm}^{-1}$, mentre quello dato dall'energia di separazione sperimentale è $k_{exp} = -1.8766 \text{ fm}^{-1}$.

Il nucleo risulta quindi avere un'energia totale di $E_{tot}^{exp} = 465.5794$ MeV, a fronte di una teorica $E_{tot}^{teo} = 282.938$ MeV.

Osservazione

La maggioranza dei nuclei presenta una densità costante nella regione centrale che diminuisce gradualmente in superficie; dalla figura 4.31 è possibile notare come la densità dei protoni presenti un massimo in $\approx r = 2$ fm. Questo succede poiché a $r = 0$ fm l'unica funzione d'onda che dà un contributo è quella dell' $1s$, la quale raggiunge il picco al centro del nucleo; le funzioni d'onda con $l \neq 0$ sono sopprese in modo da non contribuire nel centro della densità. Come risultato si ha che ogni vacanza di orbitali s produca uno svuotamento della densità nella parte centrale [33]. Dalla figura 4.30 è possibile osservare l'effetto dell'interazione $n-p$: lo svuotamento della densità dei protoni produce una parte repulsiva centrale nel potenziale dei neutroni; una modifica della densità dei protoni viene risentita dai neutroni che mostrano questo effetto nel loro potenziale. Il potenziale dei protoni, in figura 4.32, non mostra infatti lo svuotamento della densità nella parte centrale.

4.2.4 ^{40}Ca

Neutroni

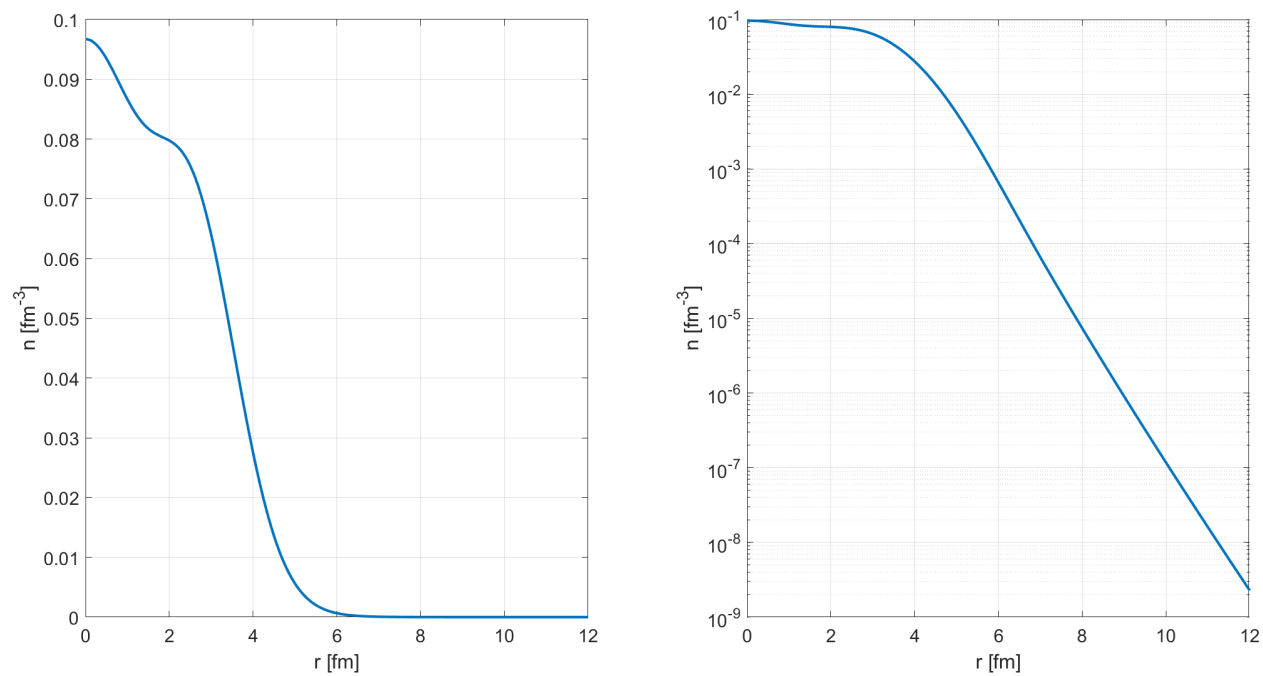


Figura 4.33: Densità neutronica del nucleo ^{40}Ca . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

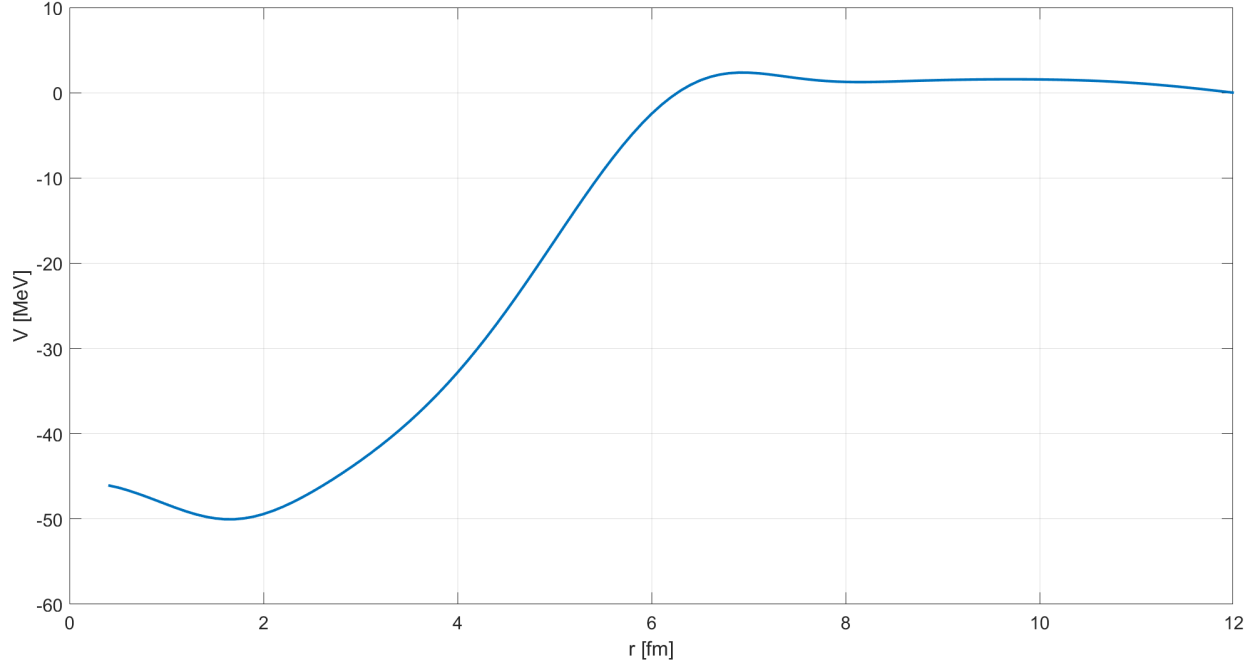


Figura 4.34: Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{40}Ca .

Orbitale	Energia [MeV]
1s	-38.0697
1p	-28.3332
1d	-17.6563
2s	-16.0346

Tabella 4.7: Energia relativa agli orbitali.

Il potenziale è stato traslato di -17.2439 MeV. L'energia di separazione sperimentale risulta essere $S_n^{exp} = 15.6340$ MeV, a fronte di quella teorica $S_n^{teo} = 14.0387$ MeV, e confrontando tale valore con l'energia dell'ultimo orbitale occupato si ha una differenza di 0.4006 MeV o del 2.6% . È stato estrapolato il coefficiente angolare della coda del logaritmo della densità che risulta essere pari a $k = -1.8972 \text{ fm}^{-1}$, mentre quello dato dall'energia di separazione sperimentale è $k_{exp} = -1.7360 \text{ fm}^{-1}$.

Protoni

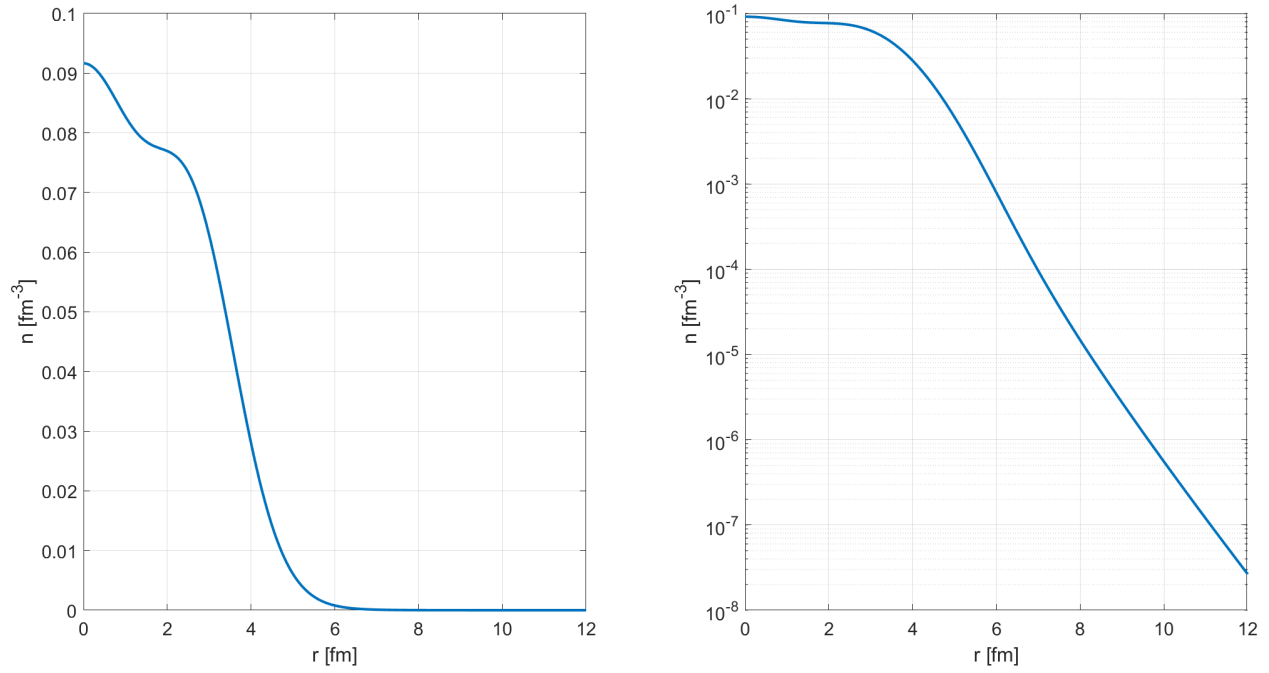


Figura 4.35: Densità protonica del nucleo ^{40}Ca . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

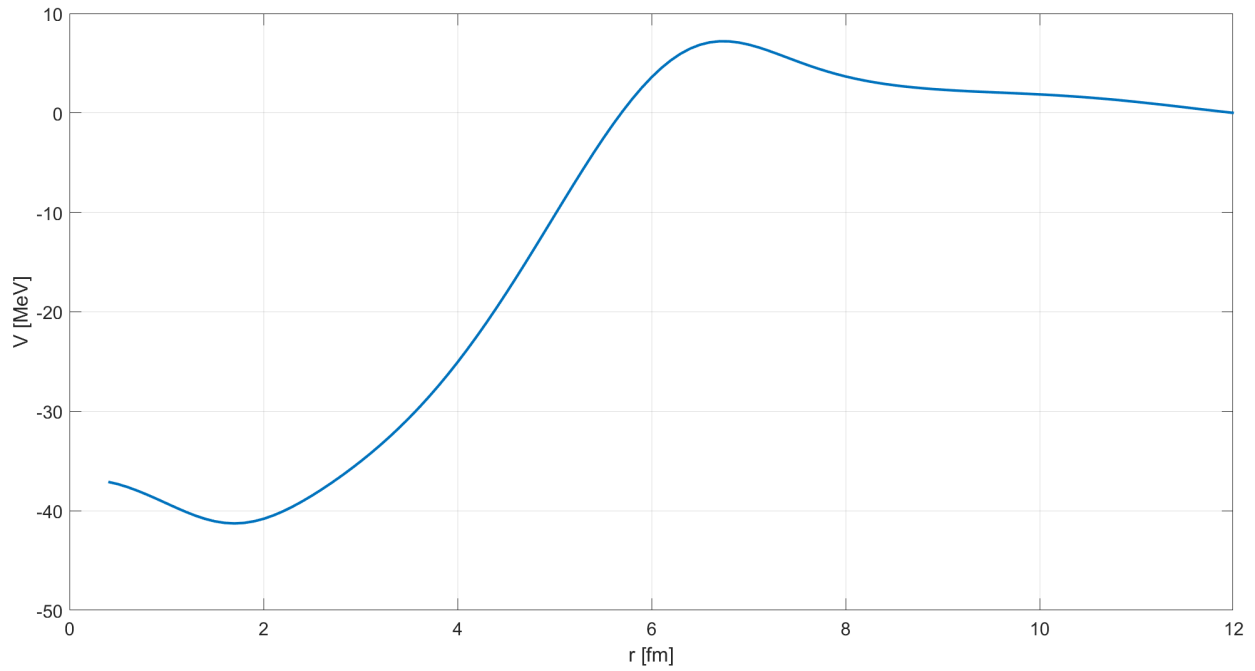


Figura 4.36: Andamento del potenziale per la densità protonica del nucleo ^{40}Ca .

Orbitale	Energia [MeV]
1s	-29.6321
1p	-20.1822
1d	-9.7713
2s	-8.1111

Tabella 4.8: Energia relativa agli orbitali.

Il potenziale è stato traslato di -9.5566 MeV. L'energia di separazione sperimentale risulta essere $S_p^{exp} = 8.3280$ MeV, a fronte di quella teorica $S_p^{teo} = 7.2018$ MeV, e confrontando tale valore con l'energia dell'ultimo orbitale occupato si ha una differenza di 0.2169 MeV o del 2.6% .

È stato estrapolato il coefficiente angolare della coda del logaritmo della densità che risulta essere pari a $k = -1.4388 \text{ fm}^{-1}$, mentre quello dato dall'energia di separazione sperimentale è $k_{exp} = -1.2671 \text{ fm}^{-1}$.

Il nucleo risulta quindi avere un'energia totale di $E_{tot}^{exp} = 522.6237$ MeV, a fronte di una teorica $E_{tot}^{teo} = 336.459$ MeV.

4.2.5 ^{48}Ca

Neutroni

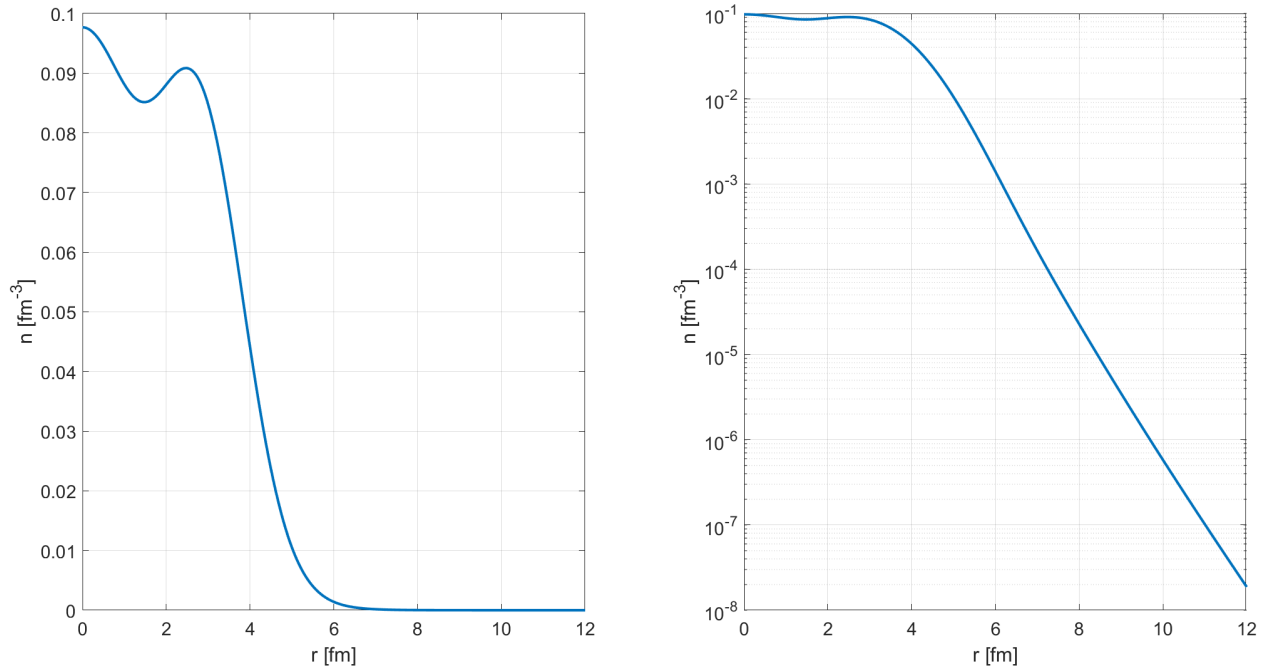


Figura 4.37: Densità neutronica del nucleo ^{48}Ca . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

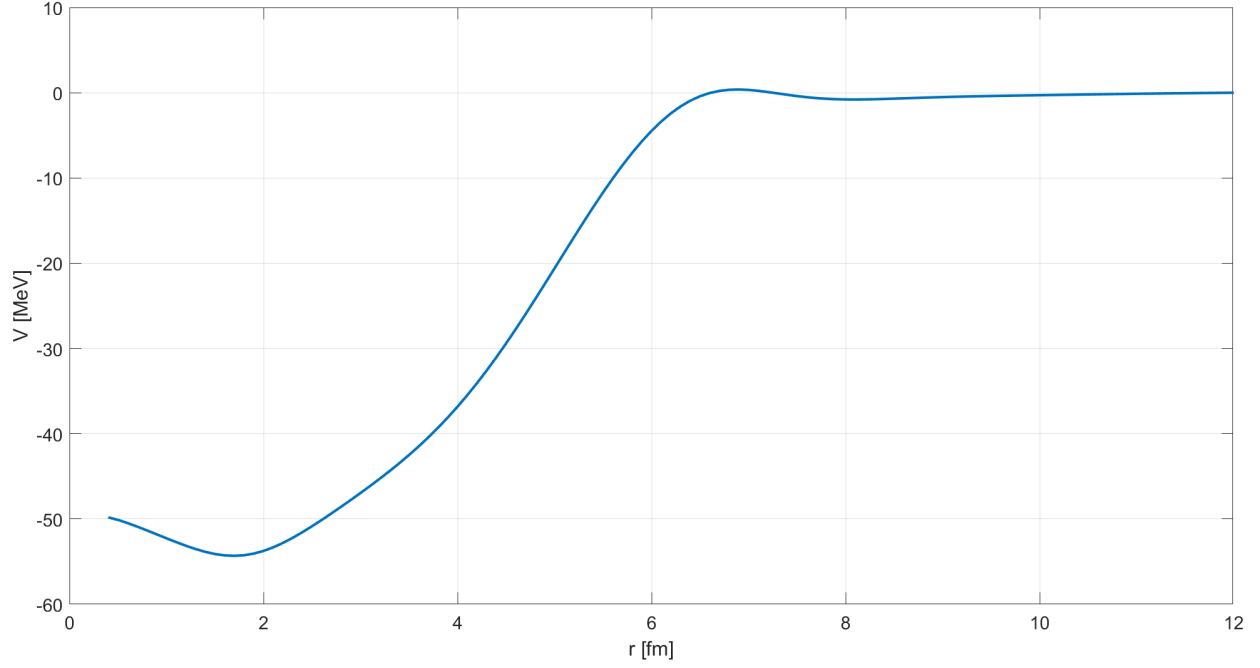


Figura 4.38: Andamento del potenziale per la densità neutronica del nucleo ^{48}Ca .

Orbitale	Energia [MeV]
1s	-42.1176
1p	-32.2988
1d	-21.5063
2s	-19.8171
1f	-10.3753

Tabella 4.9: Energia relativa agli orbitali.

Il potenziale è stato traslato di -21.1511 MeV. L'energia di separazione sperimentale risulta essere $S_n^{exp} = 8.9613$ MeV, a fronte di quella teorica $S_n^{teo} = 9.4274$ MeV, e confrontando tale valore con l'energia dell'ultimo orbitale occupato si ha una differenza di 1.4140 MeV o del 15.8% . È stato estrapolato il coefficiente angolare della coda del logaritmo della densità che risulta essere pari a $k = -1.6208 \text{ fm}^{-1}$, mentre quello dato dall'energia di separazione sperimentale è $k_{exp} = -1.3143 \text{ fm}^{-1}$.

Protoni

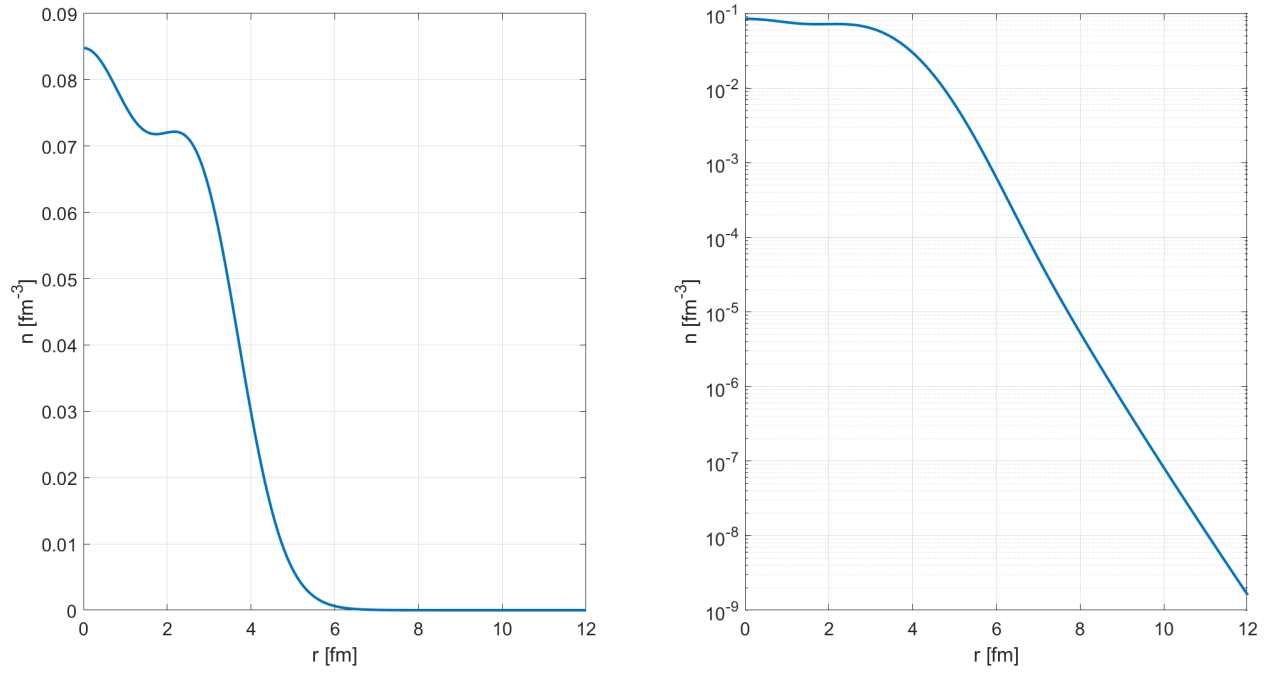


Figura 4.39: Densità protonica del nucleo ^{48}Ca . A sinistra, rappresentazione in scala lineare e, a destra, in scala logaritmica.

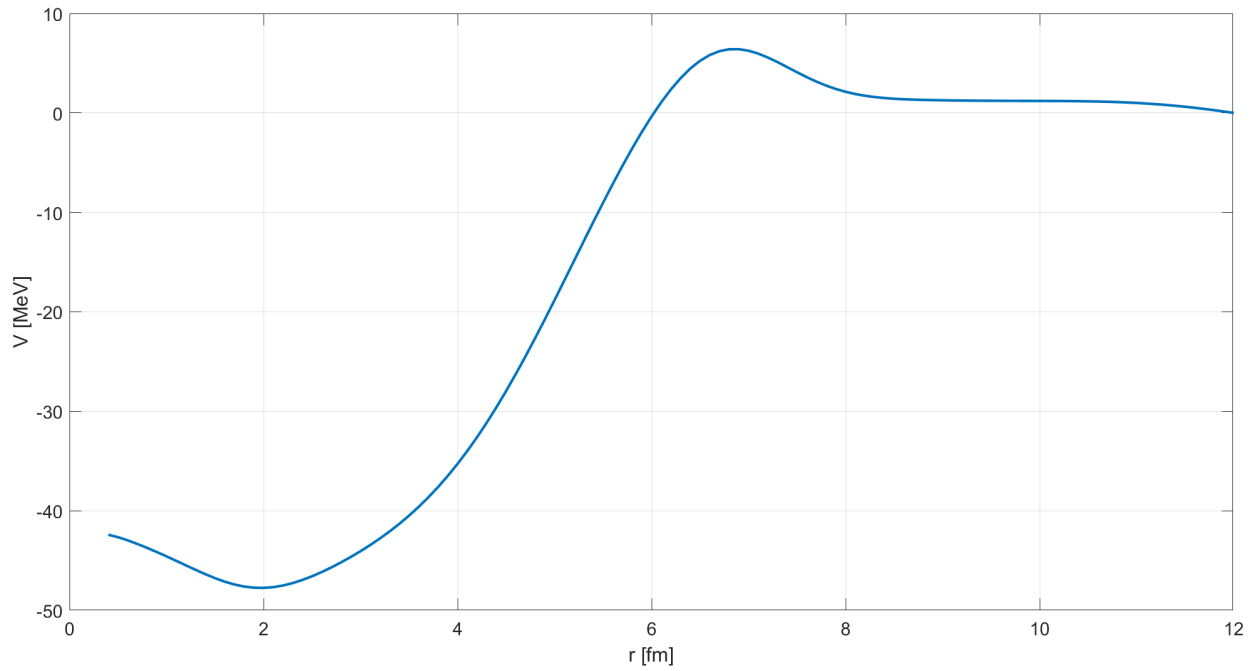


Figura 4.40: Andamento del potenziale per la densità protonica del nucleo ^{48}Ca .

Orbitale	Energia [MeV]
1s	-37.3060
1p	-28.7445
1d	-18.7868
2s	-16.0541

Tabella 4.10: Energia relativa agli orbitali.

Il potenziale è stato traslato di -18.3405 MeV. L'energia di separazione sperimentale risulta essere $S_p^{exp} = 15.2927$ MeV, a fronte di quella teorica $S_p^{teo} = 14.5280$ MeV, e confrontando tale valore con l'energia dell'ultimo orbitale occupato si ha una differenza di 0.7614 MeV o del 4.9% . È stato estrapolato il coefficiente angolare della coda del logaritmo della densità che risulta essere pari a $k = -1.8861 \text{ fm}^{-1} \text{ fm}^{-1}$, mentre quello dato dall'energia di separazione sperimentale è $k_{exp} = -1.7170 \text{ fm}^{-1}$.

Il nucleo risulta quindi avere un'energia totale di $E_{tot}^{exp} = 733.2289$ MeV.

4.2.6 Osservazioni

In tutti i potenziali neutronici ottenuti dalle densità $NNLO_{sat}$ si riscontra la presenza di una barriera, in genere piccola (qualche MeV). La causa può essere data dal fatto che le densità derivino da una dinamica a molti corpi complessa e che quindi comprendano degli effetti a molti corpi difficili da visualizzare nella stessa ma che risultano evidenti nel potenziale.

Calcolando il valore dell'altezza della barriera Coulombiana E_{CB} per la componente protonica del potenziale di ciascun nucleo, riportate in tabella 4.11, si può notare che questi presentano un massimo del potenziale vicino a quello atteso per il corretto saldamento.

Nucleo	E_{CB}^{teo}	E_{CB}^{exp}
^{16}O	3.8098	4.5049
^{24}O	3.3281	3.0024
^{34}Si	5.1858	3.0981
^{40}Ca	7.0176	7.2056
^{48}Ca	6.6039	6.4095

Tabella 4.11: Altezza della barriera Coulombiana teorica per ogni nucleo a confronto con quella ricavata dal massimo del potenziale ottenuto dal metodo di inversione.

I potenziali ottenuti mostrano tutti un corretto andamento asintotico, sia per i protoni che per i neutroni. Le figure 4.26, 4.30, 4.34, 4.34, 4.38, 4.40 mostrano tutte un minimo nella regione da $0 - 2$ fm. Le figure 4.22, 4.24, 4.28 e 4.30 mostrano un andamento nella stessa regione simile a quello del potenziale di Woods-Saxon, e tutti i potenziali mostrano una diffusività simile ad esso. Confrontando i valori teorici con le energie dell'ultimo orbitale possiamo dire che il metodo di inversione si avvicina abbastanza al modello.

4.3 Confronti

Si mostrano ora i confronti relativi alle densità neutronica del nucleo ^{40}Ca .

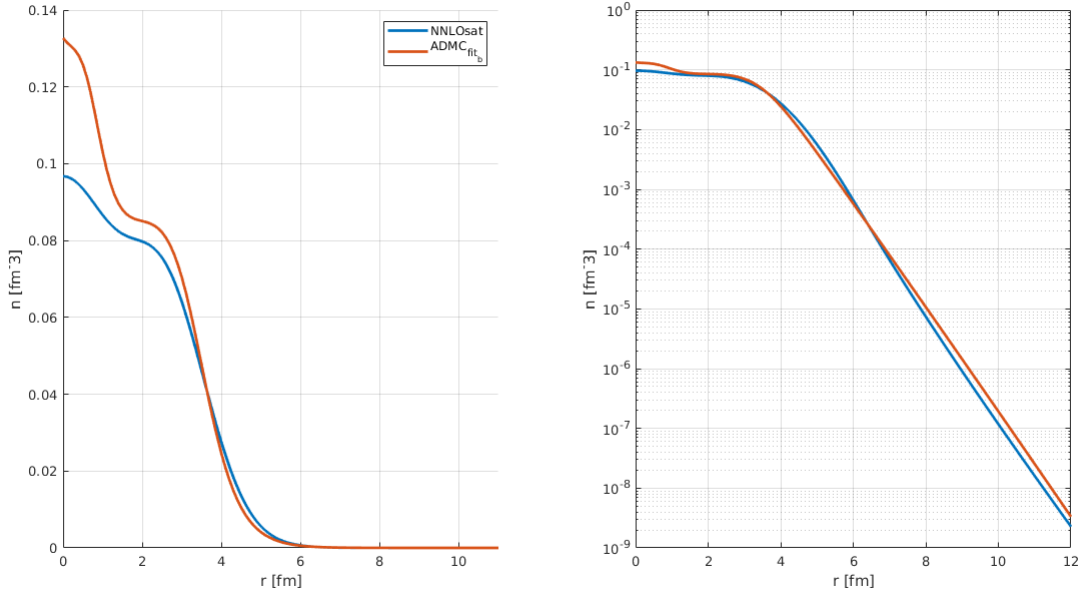


Figura 4.41: Confronto densità ADCM_{fit} e NNLO_{sat} .

Dalla figura 4.41 si nota come le due densità siano molto diverse nella regione da 0 – 2 fm e questo fatto si riflette anche sui potenziali. In figura 4.43 è possibile osservare come il potenziale derivante dalle densità ADCM sia molto oscillante rispetto a quello ricavato dalle densità NNLO_{sat} .

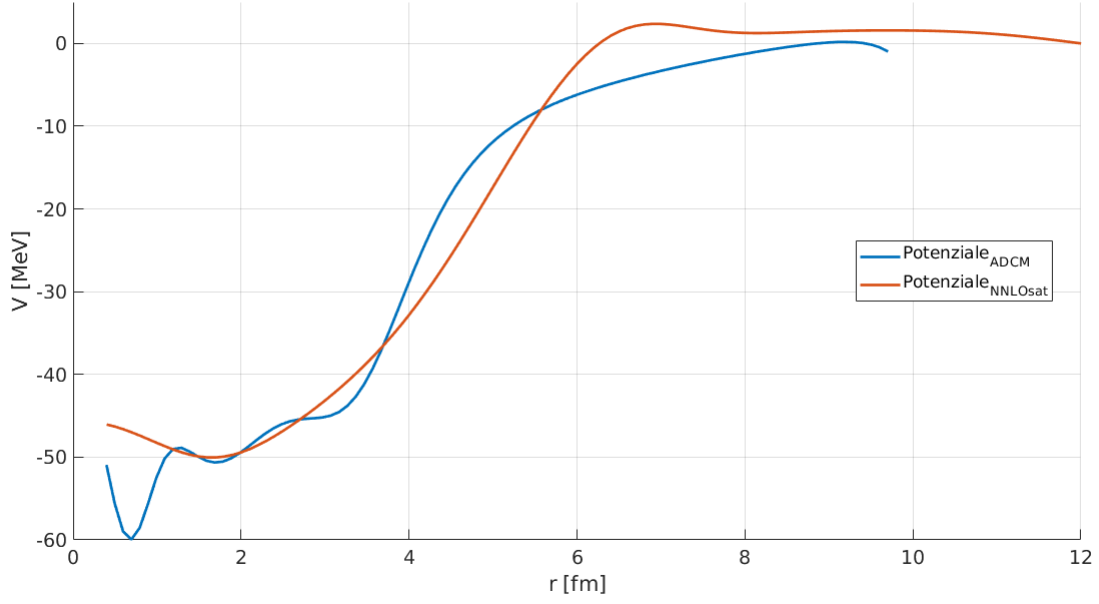


Figura 4.42: Potenziali ottenuti dalla densità $ADCM_{fit_b}$ e $NNLO_{sat}$.

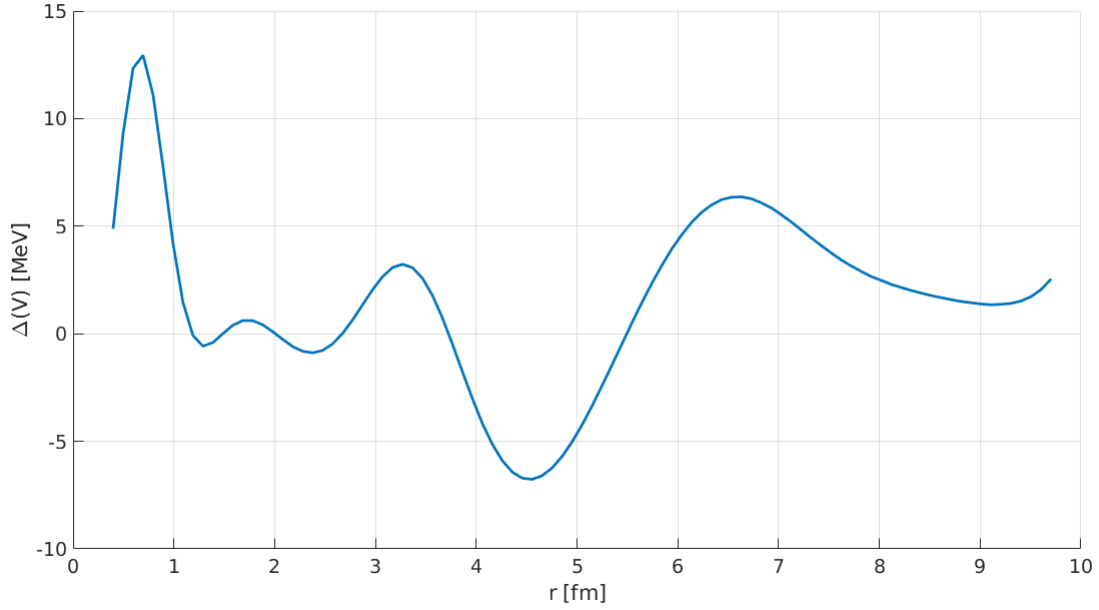


Figura 4.43: Differenza tra i potenziali relativi al nucleo ^{40}Ca per la densità neutronica ottenuti con il metodo CV relativi alla densità $ADCM_{fit_b}$ e $NNLO_{sat}$.

Viene ora mostrato il confronto con i risultati ottenuti tramite metodo vLB per la densità del $^{40}\text{Ca}_n$ sia per $ADMC$ che per $NNLO_{sat}$.

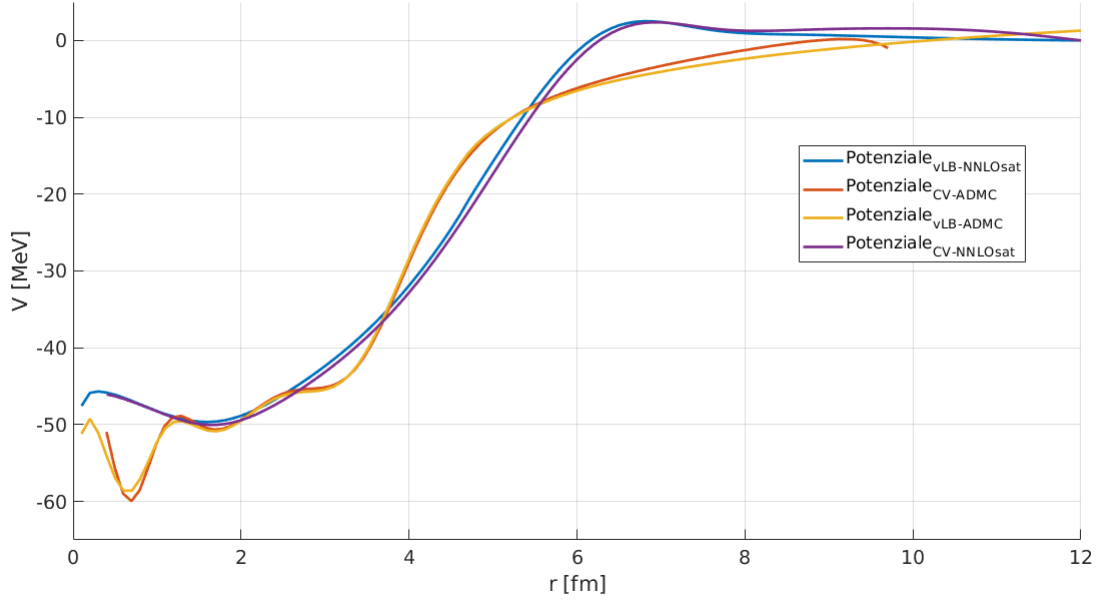


Figura 4.44: Confronto potenziali relativi al nucleo ^{40}Ca per la densità neutronica ottenuti con le diverse densità e con i due metodi.

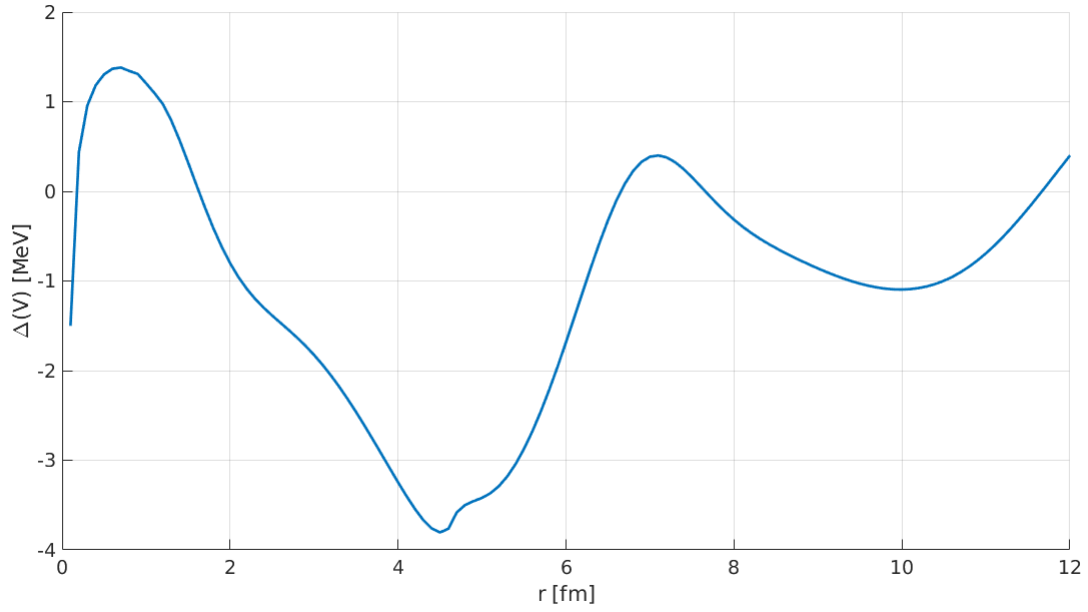


Figura 4.45: Differenza tra i potenziali relativi al nucleo ^{40}Ca per la densità neutronica ottenuti con i due metodi relativi alla densità NNLO_{sat} .

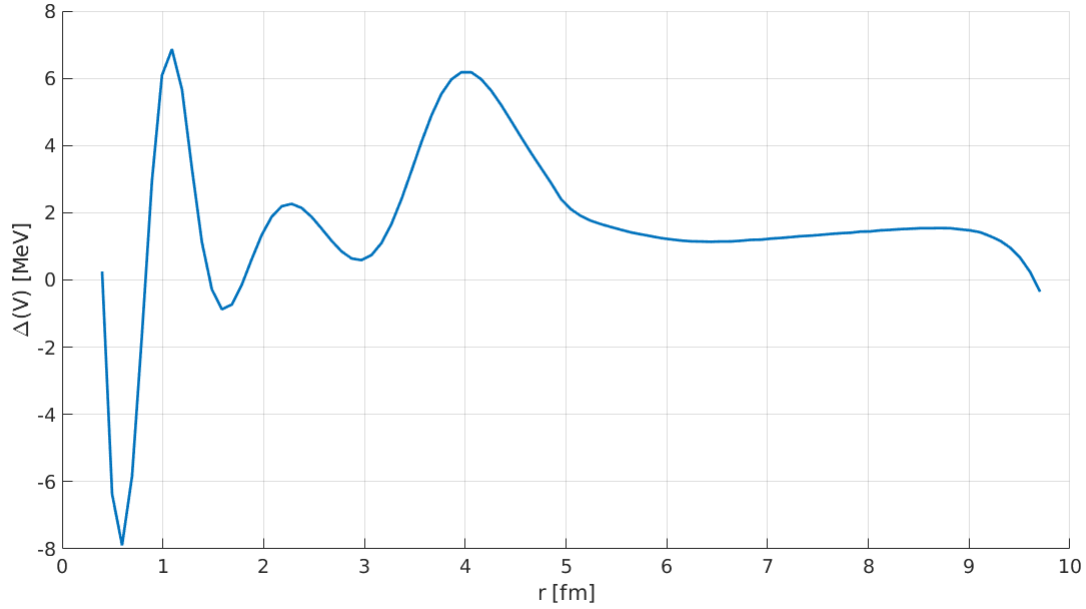


Figura 4.46: Differenza tra i potenziali relativi al nucleo ^{40}Ca per la densità neutronica ottenuti con i due metodi relativi alla densità $ADCM_{fit_b}$.

Dalle figure 4.44, 4.45, 4.46 è possibile notare come la differenza sia sempre compresa nell'unità: questo porta a dire che il processo di inversione dà risultati robusti e che i due metodi iterativi trovano un buon accordo tra loro.

Dalla figura 4.43 si nota come la differenza sia nell'ordine delle decine dei MeV. Questo porta a concludere che l'errore sul risultato dato dalle differenti densità risulta essere molto più grande dell'errore del metodo.

Conclusioni

In questo lavoro, ci siamo posti l'obiettivo di risolvere il problema inverso della DFT nei nuclei magici o doppiamente magici. Lo scopo è stato quindi quello di determinare il potenziale nucleare efficace partendo dalla conoscenza della densità, di alcuni nuclei, relativa allo stato fondamentale. Nello specifico è stato fatto uso di densità calcolate sfruttando metodi *ab initio*, quali Quantum Monte Carlo (QMC) e funzioni di Green auto-consistenti (SCGF), e che si basano su due Hamiltoniane diverse.

Per raggiungere tale scopo è stato fatto uso del metodo *constrained variational* (CV), basato sulla formulazione variazionale del problema inverso della DFT, in cui il potenziale efficace ha il ruolo di moltiplicatore di Lagrange all'interno di un problema di ottimizzazione vincolata del funzionale energia.

Nel caso di densità ottenute attraverso metodo QMC, il processo di inversione non è stato immediatamente soddisfacente. Le densità, così come vengono ricavate dal metodo che le produce, sono risultate inutilizzabili nel processo di inversione per via oscillazioni numeriche non trascurabili, che sono una caratteristica intrinseca di un metodo Monte Carlo. All'interno di questo elaborato ci si è dunque preoccupati di trovare una via che permettesse di fare uso di tali quantità come input del metodo di inversione: è stata determinata una procedura di interpolazione efficace nel ridurre il rumore. A seguito di questo procedimento siamo riusciti ad ottenere, dall'inversione del problema, un andamento per il potenziale nucleare efficace soddisfacente ma limitato ad uno specifico intervallo radiale, tipicamente $r \in [0; 6]$ fm.

Le densità derivanti da metodo SCGF non presentano, diversamente dalle prime, oscillazioni numeriche ma hanno un carattere marcatamente più liscio ed il processo di inversione ha dato immediatamente ottimi risultati. Insieme a questa loro proprietà, i potenziali nucleari così ricavati risultano aver il comportamento atteso su tutto l'intervallo su cui sono stati valutati, ovvero per $r \in [0; 12]$ fm.

Il confronto diretto delle osservabili è stato possibile solamente per i risultati ottenuti dal secondo dei due metodi. In particolare, nel caso delle energie di separazione mostrano un errore tipicamente compreso tra 0.3 MeV e 2 MeV, ma tipicamente mai con uno scarto superiore al 10%, e quindi si può parlare di un accordo apprezzabilmente soddisfacente.

I potenziali efficaci ottenuti per entrambe le due tipologie di densità sono anche stati messi a confronto con quelli ottenuti attraverso il metodo di inversione di van Leeuwen e Baerends (vLB). Da tale confronto emerge che i due metodi applicati alla stessa densità restituiscono dei potenziali nucleari, in buona misura, sovrapponibili. Questo ha permesso valutare, in maniera qualitativa, che l'errore finale sul processo di inversione è da attribuirsi maggiormente ai diversi metodi con cui state ricavate le densità che al metodo utilizzato. .

Un primo e chiaro sviluppo di questo lavoro sarebbe quello di trovare un metodo efficace per

l'interpolazione di densità derivanti da metodo QMC che sia in grado di riprodurre tanto bene la regione centrale del nucleo quanto la superficie ed il suo comportamento a grandi distanze. Obiettivo ultimo del lavoro in cui si colloca questo elaborato è quello di ricavare un vero e proprio funzionale dell'energia. Per poter fare ciò è necessario applicare il problema inverso a sistemi in cui la densità varia con continuità: in questo modo sarebbe possibile passare dal potenziale ricavato dal metodo al funzionale energia. In un nucleo vero però questa condizione non è realistica ed è quindi necessario trovare un sistema nucleare caratterizzabile in tali termini. Un esempio può essere quello di nucleoni confinati in un potenziale di oscillatore armonico che può variare con continuità.

Appendice A

Calcoli dettagliati

In quest'appendice, si completa la discussione dell'implementazione del metodo CV, oggetto del Cap. 1, riportando lo svolgimento dettagliato di alcuni calcoli svolti nella realizzazione dell'algoritmo.

A.1 Funzionale obiettivo nelle variabili riscalate

A.1.1 Funzionale energia cinetica

Abbiamo introdotto le funzioni riscalate $f_j(r)$ attraverso la relazione

$$u_j(r) = \sqrt{4\pi\tilde{n}(t)r} f_j(r) = \sqrt{4\pi} A(r) f_j(r) \quad (\text{A.1})$$

dove per comodità definiamo $A(r) = r\sqrt{\tilde{n}(r)}$.

Nell'espressione del funzionale obiettivo compaiono le derivate prime e seconde delle $u_j(r)$, che ora andremo a calcolare facendo uso di eq. A.1

$$\dot{u}(r) = \sqrt{4\pi} (\dot{A}(r) f(r) + A(r) \dot{f}(r)) \quad (\text{A.2})$$

$$\ddot{u}(r) = \sqrt{4\pi} (\ddot{A}(r) f(r) + 2\dot{A}(r) \dot{f}(r) + A(r) \ddot{f}(r)) \quad (\text{A.3})$$

Le derivate di $A(r)$ sono date da

$$\dot{A}(r) = \sqrt{\tilde{n}(r)} + \frac{\tilde{n}'(r)}{2\sqrt{\tilde{n}(r)}} r \quad (\text{A.4})$$

$$\ddot{A}(r) = \frac{\tilde{n}'(r)}{\sqrt{\tilde{n}(r)}} + \frac{r}{2} \frac{\tilde{n}''(r)}{\sqrt{\tilde{n}(r)}} - \frac{r}{4} \frac{(\tilde{n}'(r))^2}{(\tilde{n}(r))^{3/2}} \quad (\text{A.5})$$

Il funzionale energia cinetica in funzione delle $u_j(r)$ è

$$T[\{u_j\}] = \sum_j d_j \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int dr \left[u_j(r) u_j''(r) - \frac{l_j(l_j+1)}{r^2} u_j^2(r) \right] \quad (\text{A.6})$$

In funzione delle $f_j(r)$, si ha

$$T[f_j] = -\frac{4\pi\hbar^2}{2m} \sum_j d_j \int dr \left[f_j^2(r) \left(A(r)\ddot{A}(r) - \frac{l_j(l_j+1)}{r^2} A^2(r) \right) + \frac{d}{dr} [A^2(r)] f_j(r) \dot{f}_j(r) + A^2(r) f_j(r) \ddot{f}_j(r) \right] \quad (\text{A.7})$$

Si è fatto uso dell'osservazione: $2A(r)\dot{A}(r) = \frac{d}{dr}[A^2(r)]$.

Per semplificare l'espressione dell'integranda, introduciamo le funzioni $C_0(r, j)$, $C_1(r)$ e $C_2(r)$

$$\begin{aligned} C_2(r) &\stackrel{\text{def}}{=} A^2(r) = r^2 \tilde{n}(r) \\ C_1(r) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{d}{dr} C_2(r) = r^2 \tilde{n}'(r) + 2r \tilde{n}(r) \\ C_0(r, j) &\stackrel{\text{def}}{=} A(r) \ddot{r} - \frac{l_j(l_j+1)}{r^2} A^2(r) = -l_j(l_j+1) \tilde{n}(r) + r \tilde{n}'(r) + \frac{r^2}{2} \tilde{n}''(r) - \frac{r^2}{4} \frac{[\tilde{n}'(r)]^2}{\tilde{n}(r)} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Pertanto

$$T[\{f_j\}] = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) \sum_j d_j \int dr \left[C_0(r, j) f_j^2(r) + C_1(r) f_j(r) \dot{f}_j(r) + C_2(r) f_j(r) \ddot{f}_j(r) \right] \quad (\text{A.9})$$

A.1.2 Funzionale obiettivo

Il funzionale obiettivo completo del problema è definito come la somma del funzionale energia cinetica e del funzionale penalità, introdotto in Eq. 3.2.16. Si ricava immediatamente l'espressione per $O[\{f_j\}]$

$$O[\{f_j\}] = \sum_j d_j \int dr \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) [C_0(r, j) f_j^2(r) + C_1(r) f_j(r) \dot{f}_j(r) + C_2(r) f_j(r) \ddot{f}_j(r)] - \alpha f_j(r) \ddot{f}_j(r) \right\} \quad (\text{A.10})$$

È così completata la derivazione della formula riportata nel Paragrafo 3.1.3.

A.2 Derivate del funzionale obiettivo e dei vincoli

La libreria IPOPT richiede, per poter effettuare la minimizzazione vincolata di una funzione, la conoscenza delle derivate prime e seconde della funzione obiettivo e delle funzioni vincolo.

Più in particolare, occorre anzitutto fornire al programma la struttura dello Jacobiano dei vincoli e dell'Hessiana della funzione complessiva (obiettivo+vincoli) del problema, ossia indicare quali derivate non sono identicamente nulle. In secondo luogo, va specificata l'espressione analitica delle derivate stesse in funzione delle variabili del problema.

Come discusso nel Par. 3.2, le variabili del problema sono le funzioni $f_j(r)$, valutate nei diversi punti della griglia in cui è suddiviso l'intervallo di definizione del problema. In totale vi sono $N_{\text{orbitals}} \times N_{\text{points}}$ variabili scalari dalle quali dipende il problema discretizzato. Utilizziamo la notazione f_i^j in riferimento al j -esimo orbitale (f_j) valutato nell' i -esimo punto della griglia. Le derivate prime e seconde si ottengono come combinazioni lineari delle f_i^j . Per approssimare

numericamente le $\dot{f}_j$ e le $\ddot{f}_j$ si è scelto di utilizzare il metodo delle differenze finite al quarto ordine. Riportiamo le formule per il metodo delle differenze centrali

$$\dot{f}_i^j = \sum_{k=-2}^{+2} \frac{w_k}{h} f_{i+k}^j \quad \ddot{f}_i^j = \sum_{k=-2}^{+2} \frac{v_k}{h^2} f_{i+k}^j \quad (\text{A.11})$$

I coefficienti sono dati da

$$w_{-2} = \frac{1}{12} \quad w_{-1} = -\frac{2}{3} \quad w_{+1} = \frac{2}{3} \quad w_{+2} = -\frac{1}{12} \quad (\text{A.12})$$

$$v_{-2} = -\frac{1}{12} \quad v_{-1} = \frac{4}{3} \quad v_0 = -\frac{5}{2} \quad v_{+1} = \frac{4}{3} \quad v_{+2} = -\frac{1}{12} \quad (\text{A.13})$$

Essi soddisfano le seguenti proprietà di parità

$$w_{-k} = -w_k \quad v_{-k} = v_k \quad (\text{A.14})$$

L'integrale viene approssimato con una somma discreta mediante la formula di Simpson.

Il funzionale obiettivo Eq. 3.22 è stato così trasformato, nel processo di discretizzazione, in una funzione scalare delle f_i^j .

A.2.1 Gradiente della funzione obiettivo

Calcoliamo la derivata di $O(\{f_i^j\})$ rispetto alla generica variabile f_p^q .

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial f_p^q} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) \sum_j d_j \sum_i 2C_0(i, j) f_i^j \delta^{jq} \delta_{ip} + \left[C_1(i) \delta^{jq} \delta_{ip} \dot{f}_i^j + C_1(i) f_i^j \left(\sum_k \frac{w_k}{h} \delta_{i+k, p} \right) \right] + \\ &\quad + \left[C_2(i) \delta^{jq} \delta_{ip} \ddot{f}_i^j + C_2(i) f_i^j \left(\sum_k \frac{v_k}{h^2} \delta_{i+k, p} \right) \right] = \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) d_q \sum_i 2C_0(i, j) f_p^q + \left[C_1(p) \dot{f}_p^q \sum_{k=-2}^{+2} (C_1(p-k) f_{p-k}^q) \frac{w_k}{h} \right] + \\ &\quad + \left[C_2(p) \ddot{f}_p^q \sum_{k=-2}^{+2} (C_2(p-k) f_{p-k}^q) \frac{v_k}{h^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Osserviamo che, ponendo $k' = -k$ e sfruttando $w_{-k} = -w_k$, si ha

$$\sum_{k=-2}^{+2} (C_1(p-k) f_{p-k}^q) \frac{w_k}{h} = \sum_{k=-2}^{+2} (C_1(p+k') f_{p+k'}^q) \frac{w_{-k'}}{h} = - \sum_{k'} C_1(p+k') f_{p+k'}^q \frac{w_{k'}}{h} = -D_1[C_1(p) f_p^q] \quad (\text{A.16})$$

Il simbolo D_1 sta ad indicare l'operazione di calcolo della derivata numerica della funzione su cui D_1 agisce. Se H è una qualsiasi funzione di una variabile, $H = H(x)$, e se la variabile x è stata discretizzata, allora la formula per le differenze finite dà il seguente risultato per la prima derivata di H nell' i -esimo punto

$$D_1 H(i) = \sum_k \frac{w_k}{h} H(i+k) \quad (\text{A.17})$$

Nel nostro caso, $-2 \leq k \leq 2$.

Un procedimento analogo, con l'importante differenza che $v_{-k} = v_k$, porta a scrivere la seconda sommatoria come

$$\sum (C_2(p-k)f_{p-k}^q) \frac{v_k}{h^2} = D_2[C_1(p)f_p^q] \quad (\text{A.18})$$

D_2 è definito analogamente a D_1

$$D_2 H(i) = \sum_k \frac{v_k}{h^2} H(i+k) \quad (\text{A.19})$$

Quindi la derivata del funzionale $T[\{f_j\}]$ rispetto a f_p^q è

$$\frac{\partial T}{\partial f_p^q} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) d_q \left\{ 2C_0(p,q)f_p^q + [C_1(p)\dot{f}_p^q - D_1[C_1(p)f_p^q]] + [C_2(p)\ddot{f}_p^q + D_2[C_2(p)f_p^q]] \right\} \quad (\text{A.20})$$

Il calcolo delle derivate del funzionale penalità, definito in Eq. 3.2.16, è molto simile e produce il seguente risultato

$$\frac{\partial R}{\partial f_p^q} = -\alpha d_q \left\{ \ddot{f}_p^q + \sum_k \frac{v_k}{h^2} f_i^q \delta_{i,p-k} \right\} = -2\alpha d_q \ddot{f}_p^q \quad (\text{A.21})$$

Se ora sommiamo i contributi dell'energia cinetica e del termine di penalità, otteniamo la formula delle derivate del funzionale obiettivo

$$\frac{\partial O}{\partial f_p^q} = d_q \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) 2C_0(p,q)f_p^q + [C_1(p)\dot{f}_p^q - D_1[C_1(p)f_p^q]] + [C_2(p)\ddot{f}_p^q + D_2[C_2(p)f_p^q]] - 2\alpha \ddot{f}_p^q \right\}$$

(A.22)

A.2.2 Jacobiano dei vincoli

Il vincolo sulla densità 3.20 può essere scritto, dopo la discretizzazione, come

$$g_d(i) = \sum_{j=1}^{N_{orb}} d_j (f_i^j)^2 = 1 \quad (\text{A.23})$$

applicando le regole di derivazione si ottiene:

$$\frac{\partial g_d(i)}{\partial f_p^q} = 2d_q f_p^q \delta_{ip} \quad (\text{A.24})$$

La presenza della delta di Kronecker esprime il fatto che solo le derivate di $g_d(i)$ rispetto a f_i^q non sono identicamente nulle.

Valutiamo ora l'espressione delle derivate dei vincoli di ortonormalità

$$G_{ij}[\{f_i\}] = \int_0^{infy} 4\pi \tilde{n}(r) r^2 f_i(r) f_j(r) dr = 1 \quad se \ l_i = l_j, j_i = j_j; i = 1...N_{orb}, j \leq i \quad (\text{A.25})$$

Se $i \neq j$, per ogni G_{ij} esistono $2M$ derivate non identicamente nulle: quelle rispetto a f_p^i e f_p^j con $p = 1...N_{point}$, altrimenti si hanno solo N_{points} termini non nulli per ogni valore di i .

Il numero di elementi non nulli dello Jacobiano risulta quindi essere $MN(N+1)$.

A.2.3 Hessiana

Per determinare le derivate seconde del funzionale energia cinetica, è sufficiente esplicitare la sommatoria nella definizione delle derivate contenute in (A.20) e applicare le regole di derivazione:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial f_p^q \partial f_r^s} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) d_q \delta^{sq} \left\{ 2C_0(p, q) \delta_{pr} + \left[C_1(p) \frac{w_{r-p}}{h} - C_1(r) \frac{w_{r-p}}{h} \right] + \left[C_2(p) \frac{v_{r-p}}{h^2} - C_2(r) \frac{v_{r-p}}{h^2} \right] \right\} \quad (\text{A.26})$$

Si può fare altrettanto per calcolare le derivate seconde del termine di penalità:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial f_p^q \partial f_r^s} = -2\alpha \delta^{qs} \left(\sum_k \frac{v_k}{h^2} \delta_{p+k, r} \right) = -2\alpha \delta^{qs} \left(\frac{v_{r-p}}{h^2} \right) \quad (\text{A.27})$$

Rimane quindi da individuare quali elementi non risultano essere non identicamente nulli. Poichè sono significative le derivate di uno stesso orbitale è necessario che sia $s = q$, ed essendo l'hessiana simmetrica possiamo limitarci a considerare solo la sottomatrice triangolare inferiore quindi $r \leq p$. Notiamo che i coefficienti w_{r-p} e v_{r-p} risultano essere diversi da zero solo se $r - p = 0, 1, 2$ in quanto è stato scelto di approssimare le derivate tramite la formula delle differenze finite al quarto ordine.

I contributi non nulli risultano essere, in ordine per $r = p$, $r = p - 1$, $r = p - 2$:

$$\frac{\partial^2 O}{\partial f_p^q \partial f_p^q} = d_q \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) \left(2C_0(p, q) + 2\frac{v_0}{h^2} c_2(p) \right) - s\alpha \frac{v_0}{h^2} \right\} \quad (\text{A.28})$$

$$\frac{\partial^2 O}{\partial f_p^q \partial f_{p-1}^q} = d_q \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) \left[\frac{w_{-1}}{h} (C_1(p) - C_1(p-1)) + \frac{v_{-1}}{h^2} (C_2(p) + C - 2(p-1)) \right] - 2\alpha \frac{v_{-1}}{h^2} \right\} \quad (\text{A.29})$$

$$\frac{\partial^2 O}{\partial f_p^q \partial f_{p-2}^q} = d_q \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \right) \left[\frac{w_{-2}}{h} (C_1(p) - C_1(p-2)) + \frac{v_{-2}}{h^2} (C_2(p) + C - 2(p-2)) \right] - 2\alpha \frac{v_{-2}}{h^2} \right\} \quad (\text{A.30})$$

Riportiamo anche le derivate seconde dei vincoli.

Per il vincolo sulle densità si ha:

$$\frac{\partial^2 g_d(i)}{\partial f_s^r \partial f_p^q} = 2d_q \delta_{ir} \delta_{qs} \quad (\text{A.31})$$

I soli termini non nulli sono quelli per cui $s = q$ e $i = r = p$. Per i vincoli di ortonormalità si ha:

$$\frac{\partial^2 G_{ij}}{\partial f_p^q \partial f_r^s} = 4\pi \tilde{n}(r) r_p^2 (\delta^{is} \delta^{jq} + \delta^{iq} \delta^{js}) \delta_{rp} \quad (\text{A.32})$$

Per la simmetria rispetto al cambio delle derivate ci limitiamo al caso $s \leq q$. I contributi non identicamente nulli risultano essere:

$$i = j \quad \frac{\partial^2 G_{ii}}{\partial f_p^i \partial f_p^i} = 8\pi \tilde{n}(r_p) r_p^2 \quad (\text{A.33})$$

$$i \neq j \quad \frac{\partial^2 G_{ii}}{\partial f_p^i \partial f_p^i} = 4\pi \tilde{n}(r_p) r_p^2 \quad (\text{A.34})$$

Bibliografia

- [1] G. Accorto, P. Brandolini, F. Marino, A. Porro, A. Scalesi, G. Colò, X. Roca-Maza, and E. Vigezzi. First step in the nuclear inverse kohn-sham problem: From densities to potentials. *Phys. Rev. C*, 101:024315, Feb 2020.
- [2] G. Vikram AU B. Kanungo, P. M. Zimmerman. Exact exchange-correlation potentials from ground-state electron densities. *Nature Communications*, 10:4497, Oct 2019.
- [3] Carlo Barbieri and Arianna Carbone. *Self-Consistent Green’s Function Approaches*, pages 571–644. Springer International Publishing, Cham, 2017.
- [4] Michael Bender, Paul-Henri Heenen, and Paul-Gerhard Reinhard. Self-consistent mean-field models for nuclear structure. *Rev. Mod. Phys.*, 75:121–180, Jan 2003.
- [5] Klaus Capelle. A bird’s-eye view of density-functional theory. *Brazilian Journal of Physics*, 36:1318 – 1343, 12 2006.
- [6] 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. *Rev. Mod. Phys.*, 87:1067–1118, Sep 2015.
- [7] H. De Vries, C.W. De Jager, and C. De Vries. Nuclear charge and magnetization density distribution parameters from elastic electron scattering. *Atom. Data Nucl. Data Tabl.*, 36:495–536, 1987.
- [8] J. Dechargé and D. Gogny. Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the *D1* effective interaction on spherical nuclei. *Phys. Rev. C*, 21:1568–1593, Apr 1980.
- [9] C. Drischler, K. Hebeler, and A. Schwenk. Chiral interactions up to next-to-next-to-next-to-leading order and nuclear saturation. *Phys. Rev. Lett.*, 122:042501, Jan 2019.
- [10] A. Ekström, G. R. Jansen, K. A. Wendt, G. Hagen, T. Papenbrock, B. D. Carlsson, C. Forssén, M. Hjorth-Jensen, P. Navrátil, and W. Nazarewicz. Accurate nuclear radii and binding energies from a chiral interaction. *Phys. Rev. C*, 91:051301, May 2015.
- [11] E. Epelbaum, H.-W. Hammer, and Ulf-G. Meißner. Modern theory of nuclear forces. *Rev. Mod. Phys.*, 81:1773–1825, Dec 2009.
- [12] G. Fricke, C. Bernhardt, K. Heilig, L.A. Schaller, L. Schellenberg, E.B. Shera, and C.W. Dejager. Nuclear ground state charge radii from electromagnetic interactions. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 60(2):177 – 285, 1995.

- [13] Colò G. *Nuclear Physics*. Lecture notes, University of Milan, 2014/2015.
- [14] Stefano Gandolfi, Alexandros Gezerlis, and J. Carlson. Neutron matter from low to high density. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, 65(1):303–328, 2015.
- [15] Stefano Gandolfi, Diego Lonardoni, Alessandro Lovato, and Maria Piarulli. Atomic nuclei from quantum monte carlo calculations with chiral eft interactions. *Frontiers in Physics*, 8, 04 2020.
- [16] 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.
- [17] Morten Hjorth-Jensen, Maria Lombardo, and U. van Kolck. *An Advanced Course in Computational Nuclear Physics: Bridging the Scales from Quarks to Neutron Stars*. 01 2017.
- [18] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 136:B864–B871, Nov 1964.
- [19] E. Somersalo Jari Kaipio. *Statistical and Computational Inverse Problems*. Springer-Verlag New York, 2005.
- [20] Daniel S. Jensen and Adam Wasserman. Numerical methods for the inverse problem of density functional theory. *International Journal of Quantum Chemistry*, 118(1):e25425, 2018.
- [21] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140:A1133–A1138, Nov 1965.
- [22] Kenneth S. Krane. *Introductory nuclear physics*. Wiley, New York, NY, 1988.
- [23] Winfried Leidemann and Giuseppina Orlandini. Modern ab initio approaches and applications in few-nucleon physics with a4. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 68:158 – 214, 2013.
- [24] Mel Levy. Universal variational functionals of electron densities, first-order density matrices, and natural spin-orbitals and solution of the v-representability problem. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 76(12):6062–6065, 1979.
- [25] Elliott H. Lieb. Density functionals for coulomb systems. *International Journal of Quantum Chemistry*, 24(3):243–277, 1983.
- [26] Felipe J. Llanes-Estrada and Eva Lope-Oter. Hadron matter in neutron stars in view of gravitational wave observations. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 109:103715, 2019.
- [27] Diego Lonardoni and Francesco Pederiva. Medium-mass hypernuclei and the nucleon-isospin dependence of the three-body hyperon-nucleon-nucleon force, 2018.
- [28] Alessandro Lovato, Omar Benhar, Stefano Fantoni, Alexey Yu. Illarionov, and Kevin E. Schmidt. Density-dependent nucleon-nucleon interaction from three-nucleon forces. *Phys. Rev. C*, 83:054003, 2011.

- [29] J.E. Lynn, I. Tews, S. Gandolfi, and A. Lovato. Quantum monte carlo methods in nuclear physics: Recent advances. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, 69(1):279–305, 2019.
- [30] R. Machleidt and F. Sammarruca. Can chiral eft give us satisfaction? *The European Physical Journal A*, 56(3), Mar 2020.
- [31] Francesco Marino. Formulazione variazionale del problema inverso della dft, 2018.
- [32] Martin, Rothen. *Many body problems and Quantum Field Theory*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- [33] A. Mutschler, A. Lemasson, O. Sorlin, D. Bazin, C. Borcea, R. Borcea, Z. Dombrádi, J.-P. Ebran, A. Gade, H. Iwasaki, and et al. A proton density bubble in the doubly magic ^{34}Si nucleus. *Nature Physics*, 13(2):152–156, Oct 2016.
- [34] John P. Perdew and Mel Levy. Comment on “significance of the highest occupied kohn-sham eigenvalue”. *Phys. Rev. B*, 56:16021–16028, Dec 1997.
- [35] Peter Ring, Peter Schuck. *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1980.
- [36] M. Piarulli, I. Bombaci, D. Logoteta, A. Lovato, and R. B. Wiringa. Benchmark calculations of pure neutron matter with realistic nucleon-nucleon interactions. *Phys. Rev. C*, 101:045801, Apr 2020.
- [37] D. Pollock. Smoothing with cubic splines. *Handbook of Time Series Analysis, Signal Processing, and Dynamics*, 12 1999.
- [38] J. Pople, R. Seeger, and R. Krishnan. Variational configuration interaction methods and comparison with perturbation theory. *International Journal of Quantum Chemistry*, 12:149 – 163, 01 2009.
- [39] A. Rios. Green’s functions techniques for extended nuclear systems, 2020.
- [40] Pierre C Sabatier. Inverse problems - an introduction. *Inverse Problems*, 1(1), feb 1985.
- [41] Francesca Sammarruca and Randy Millerson. Nuclear forces in the medium: Insight from the equation of state. *Frontiers in Physics*, 7:213, 2019.
- [42] Shihang Shen, Haozhao Liang, Wen Hui Long, Jie Meng, and Peter Ring. Towards an ab initio covariant density functional theory for nuclear structure. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 109:103713, 2019.
- [43] T. H. R. Skyrme. Cvii. the nuclear surface. *Philosophical Magazine*, 1(11):1043–1054, 1956.
- [44] Alexander Tichai, Robert Roth, and Thomas Duguet. Many-body perturbation theories for finite nuclei, 2020.
- [45] Tanja van Mourik, Michael Bühl, and Marie-Pierre Gageot. Density functional theory across chemistry, physics and biology introduction. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, 372:20120488, 02 2014.

- [46] Andreas Wächter and Lorenz T. Biegler. Line search filter methods for nonlinear programming: Motivation and global convergence. *SIAM Journal on Optimization*, 16(1):1–31, February 2006.
- [47] Andreas Waechter. Getting started with ipopt in 90 minutes: Short tutorial. In *Combinatorial Scientific Computing*, 2009.
- [48] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks, and R. Schiavilla. Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking. *Phys. Rev. C*, 51:38–51, Jan 1995.