



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO
FACOLTÀ DI SCIENZE E TECNOLOGIE

Laurea Triennale in Fisica

Deduzione di potenziale medio e massa efficace dei nucleoni dalle densità nucleari

Relatore: **Prof. Gianluca Colò**

Correlatore: **Dott. Xavier Roca Maza**

Elaborato finale di:

X. Nicolle Martinez Cuenca

Matricola n° 848777

A.A. 2016/2017

Sommario

I potenziali efficaci più usati al giorno d'oggi per descrivere la fenomenologia del nucleo nel suo stato fondamentale sono fortemente dipendenti da parametri liberi opportunamente adattati ai dati sperimentali. Lo scopo che si pone questo lavoro è quello di dare le basi per una teoria di carattere generale, in grado di generare un potenziale efficace per un sistema nucleare arbitrario, senza ipotesi *ad hoc*.

A questo proposito ci si avvale dell'uso di una teoria che ha riscontrato enorme successo in ambito atomico, ovvero la *Teoria del Funzionale Densità* (DFT), adatta allo studio di sistemi fermionici, e che sfrutta il legame biunivoco tra l'energia del sistema e la densità di probabilità della materia, resa più accessibile dalla formulazione di Kohn e Sham. In particolare, l'inversione delle equazioni di Kohn-Sham è quella che consente di risalire ad un potenziale efficace a partire dalla densità.

Finora i tentativi di una sua applicazione in ambito nucleare sono stati molto pochi, ma esistono alcuni studi preliminari in cui sono stati ricavati i potenziali efficaci per alcuni nuclei doppi magici a partire da densità sperimentali parametrizzate, e da densità teoriche ottenute con metodi Monte Carlo.

In questo nuovo lavoro ci si è occupati di ritrovare i potenziali efficaci citati precedentemente per i nuclei di ^{16}O , ^{40}Ca e ^{208}Pb , ponendo particolare attenzione sul metodo utilizzato per invertire le equazioni di Kohn-Sham. In seguito si è cercato di migliorare i risultati relativi alle energie di particella singola aggiungendo alla trattazione un termine dipendente dal gradiente della densità che può essere tradotto in termini di una massa efficace per i singoli nucleoni.

Si è trovato che l'applicazione della formulazione inversa delle equazioni di Kohn-Sham fornisce buoni risultati anche nei casi in cui la massa efficace assume un valore compreso tra 0.6 – 0.9 volte il valore della massa nuda. In particolare, le energie di particella singola per i livelli noti sperimentalmente, che sono quelli più vicini alla superficie di Fermi, tendono ad avvicinarsi ai valori sperimentali qualora il rapporto tra massa efficace e massa nuda assuma un valore compreso tra 0.8 e 0.9 per i nuclei leggeri e tra 0.9 e 1.0 per il ^{208}Pb .

Indice

Notazione e Costanti	iii
1 Introduzione	1
2 Strumenti Teorici	3
2.1 Il campo medio nucleare	3
2.1.1 Potenziali Fenomenologici	5
2.2 Teoria del Funzionale Densità	8
2.2.1 I Teoremi di Hohenberg e Kohn	8
2.2.2 Le equazioni di Kohn-Sham	11
2.3 Massa efficace del nucleone	13
2.3.1 Campo medio dipendente dal momento	13
2.3.2 m^*/m nell'equazione di Schroedinger	15
3 Applicazione del Modello	19
3.1 Equazione di Schroedinger	19
3.1.1 Algoritmo di <i>Shooting</i>	20
3.1.2 Test	22
3.2 Inversione delle equazioni di Kohn-Sham	24
3.3 Densità	27
3.3.1 Densità Parametrizzate	27
3.3.2 Densità da Simulazioni di tipo Montecarlo	30
4 Risultati: Potenziali	31
4.1 Densità parametrizzate SOG	32
4.2 Densità parametrizzate Fermi (a 3 parametri)	37
4.3 Densità ottenute da metodi Monte-Carlo	38
4.3.1 AV18 + UIX	40
4.3.2 AV18	41
4.4 Commenti finali	44

5	Risultati: Massa Efficace	47
5.1	Energie di particella singola	47
5.1.1	Sostituzione diretta	48
5.1.2	Metodo Perturbativo	54
5.2	Energia Totale	59
6	Conclusioni	61
	Bibliografia	62

Notazione e Costanti

Nel presente elaborato, a meno di eccezioni indicate esplicitamente, sono adottate le notazioni e costanti sotto indicate:

Numero di neutroni N

Numero di protoni Z

Numero di nucleoni $A = N+Z$

Massa nucleone $mc^2 = 938.27 \text{ MeV}$

Carica elementare $q_e \approx 1.6022 \times 10^{-19} C \approx 1.2 \text{ MeV fm}^{\frac{1}{2}}$

Raggio nucleare $R_n \approx r_0 A^{1/3} \approx 1.27 A^{1/3} \text{ fm}$

Spessore della superficie nucleare $a_0 = 0.67 \text{ fm}$

Costante di Planck $\hbar c = 197.32 \text{ MeV}$

Operatore Laplaciano ∇^2

Le costanti fondamentali sono quelle presenti in [1].

Capitolo 1

Introduzione

La conoscenza non completa dell'interazione nucleare efficace nel mezzo, e l'impossibilità di risolvere il problema a molti corpi in modo esatto, fanno del nucleo un sistema estremamente complesso da studiare. Se non altro, la fenomenologia è abbondante, e gli esperimenti mettono in evidenza una classe di fenomeni così ampia da rendere pressoché impossibile racchiudere tutte le sue caratteristiche in una sola teoria.

Tra i vari modelli studiati sinora, quelli di *campo medio* riflettono adeguatamente buona parte dei fenomeni; in particolare risultano idonei per lo studio dei nuclei pesanti e per la descrizione delle proprietà di *bulk* (livelli energetici, densità, raggio nucleare...). Le buone prestazioni di questi modelli sono da ricondurre alla natura poco densa del nucleo: dai dati empirici è noto infatti che, all'interno del volume nucleare, la densità può essere considerata approssimativamente costante e pari circa a $0.16 fm^{-3}$. In una tale regione interna, la distanza media tra i nucleoni ($\sim 2 fm$) risulta sufficientemente grande per far sì che protoni e neutroni non risentano della parte più importante della repulsione dovuta all'interazione forte, a *range* molto breve. Queste stime dunque, sostengono il modello di campo medio, in cui ogni nucleone si può immaginare sottoposto ad un potenziale efficace dato dalla media delle sue interazioni con gli altri nucleoni.

Questa proprietà del nucleo, di essere un sistema diluito, è quindi quella che consente di descrivere la sua struttura e parte delle sue proprietà con il modello a *shell*, nato in ambito atomico. Infatti, nonostante la diversità delle interazioni che reggono elettroni, in un caso, e nucleoni, nell'altro, poter tralasciare in prima approssimazione la parte repulsiva a breve *range* dell'interazione forte rende possibile delineare i due diversi fenomeni sotto uno stesso profilo, e descrivere la diversità della loro fenomenologia con la comune teoria degli orbitali.

I modi più comuni in cui possono essere ricavati i campi medi sopra descritti

sono due: da una parte esistono potenziali fenomenologici, che hanno una forma analitica semplice, basata su proprietà generali del nucleo quali la sua geometria o i livelli di particella singola (infatti, ad esempio, i potenziali di tipo Woods-Saxon descrivono bene raggi nucleari ed energie di separazione). I potenziali efficaci più affermati però, sono quelli generati da metodi numerici auto-consistenti come quello di Hartree-Fock. Questi ultimi dipendono fortemente da parametri opportunamente adeguati ai dati sperimentali, e il loro utilizzo porta con sé lo svantaggio di non rappresentare un modello teorico indipendente dallo specifico sistema in esame, poiché non si è in grado di descrivere la fenomenologia senza essersi avvalsi di *fit* preliminari. Lo scenario ideale sarebbe quello introdotto da una teoria di carattere generale, in grado di riprodurre i risultati provenienti dai dati sperimentali per ogni sistema nucleare, a partire da grandezze fisiche comuni a tutti e senza ulteriori adattamenti al caso singolo.

A questo proposito, un approccio che ha riscontrato enorme successo in ambito atomico è stato l'utilizzo della *Teoria del Funzionale Densità* (DFT), che nasce per lo studio di sistemi fermionici e sfrutta il legame biunivoco tra l'energia del sistema e la densità di probabilità della materia. Un suo utilizzo alternativo, nonché raramente esplorato anche solo nello studio della materia condensata, è quello della sua formulazione inversa, che permette di risalire ad un potenziale efficace a partire da metodi variazionali. Finora i tentativi di una sua applicazione in ambito nucleare sono quasi inesistenti, ma è evidente che il suo utilizzo consentirebbe di lasciare da parte la forte dipendenza dai parametri fenomenologici imposta dai modelli di campo medio precedenti.

Questo gruppo di ricerca ha fatto alcuni studi preliminari per verificare la validità dell'applicazione della formulazione inversa della DFT al problema nucleare nei casi più semplici, ovvero quelli che permettono di sfruttare le proprietà di simmetria del nucleo. I primi riscontri numerici indicano che questo modello è in grado di fornire potenziali efficaci nucleari molto validi in un confronto con quelli ottenuti tramite altri modelli di campo medio. È interessante perciò approfondire il suo utilizzo, le sue varie formulazioni e indagare più a fondo su tutti i contributi della densità, tra cui quelli dipendenti dal suo gradiente, che possono avere maggiore influenza sul potenziale efficace risultante.

Capitolo 2

Strumenti Teorici

La possibilità di adattare il modello a *shell* al problema nucleare rappresenta un grande vantaggio, in quanto ne semplifica la trattazione. In questo modo, per un certo potenziale, la soluzione dell'equazione di Schroedinger fornisce grandezze come le energie di particella singola o le densità di probabilità -derivate dalle autofunzioni- che possono essere direttamente confrontate con i dati sperimentali attualmente disponibili.

2.1 Il campo medio nucleare

Oltre all'osservazione che il nucleo sia un sistema a bassa densità, a spingere sulla strada delle teorie di campo medio, è stata l'impossibilità di risolvere l'equazione di Schroedinger in modo esatto per A nucleoni¹ fortemente interagenti. Si è vista la necessità di trovare metodi approssimativi che potessero convertire il problema vero di particelle fortemente interagenti, a quello di un sistema in cui le particelle non interagissero, ma risentissero di un campo esterno; e in cui le interazioni residue potessero essere trattate con metodi perturbativi.

Nell'approssimazione di campo medio ogni nucleone può essere pensato come se si muovesse in un campo esterno creato dai rimanenti $A - 1$ nucleoni. Così, l'Hamiltoniana di campo medio è più facile da trattare, poiché la corrispondente equazione di Schroedinger per A nucleoni

$$H_{MF}\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_A) = E\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_A) \quad (2.1)$$

¹ O almeno per $A > 10$.

può essere fattorizzata usando l'autofunzione di prova,

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_A) = \sum_P (-1)^{\{P\}} \phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) \dots \phi_{\alpha_A}(\mathbf{r}_A). \quad (2.2)$$

Dove la sommatoria su P indica una somma su tutte le generiche permutazioni delle α_i , le ϕ_{α_i} sono le autofunzioni di particella singola e la $\{P\}$ indica la parità della permutazione. In questo modo, nel caso di fermioni, si scrive il prodotto antisimmetrizzato delle funzioni d'onda di singola particella, che tiene conto del principio di Pauli.

Sostituendo la 2.2 nella 2.1 si ottengono A equazioni identiche per un solo nucleone e si può scrivere l'Hamiltoniana totale come somma delle Hamiltoniane di particella singola:

$$H_{MF}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_A) = \sum_{i=1}^A h(\mathbf{r}_i) \quad (2.3)$$

$$h(\mathbf{r}_i) \phi_{\alpha}(\mathbf{r}_i) = \epsilon_{\alpha} \phi_{\alpha}(\mathbf{r}_i) \quad (2.4)$$

dove

$$h(\mathbf{r}_i) = t(\mathbf{r}_i) + v(\mathbf{r}_i) = \frac{-\hbar^2}{2m_N} \nabla^2 + v(\mathbf{r}_i) \quad (2.5)$$

ed

$$E = \sum_{i=1}^A \epsilon_{\alpha_i}. \quad (2.6)$$

La soluzione dell'equazione di Schroedinger 2.1 è quindi un prodotto di funzioni d'onda di singola particella ottenute risolvendo un'equazione di Schroedinger a un nucleone per un potenziale esterno $v(\mathbf{r}_i)$.

Tra i campi medi $v(\mathbf{r}_i)$ che possono minimizzare al meglio l'interazione residua vi è quello ottenuto tramite il metodo di Hartree-Fock. Questo potenziale è generato tramite un procedimento numerico, iterativo e auto-consistente, in cui, soddisfatta la condizione di convergenza, autostati e autoenergie associate sono generati simultaneamente; inoltre è di tipo centrale, cioè funzione della sola variabile $\vec{r}$.

Per semplificare ulteriormente la trattazione ci si riferirà in questo lavoro esclusivamente a nuclei aventi *shell* chiuse, ovvero a nuclei doppi magici, tale da poter trascurare gli effetti di *pairing*.

2.1. IL CAMPO MEDIO NUCLEARE

2.1.1 Potenziali Fenomenologici

Spesso è possibile approssimare il potenziale di campo medio dandogli una precisa forma analitica, discendente dalle proprietà fenomenologiche note ed evitando i passaggi che portano all'auto-consistenza. Il più semplice è il potenziale ad oscillatore armonico tridimensionale

$$v_{HO}(r) = kr^2 = \frac{1}{2}m_N\omega^2r^2 \quad (2.7)$$

con

$$\hbar\omega = \frac{41}{A^{1/3}} \text{ MeV}. \quad (2.8)$$

Questa scelta è giustificata dalla possibilità di approssimare il campo medio nucleare con una buca armonica².

Se inoltre la frequenza soddisfa la condizione soprastante³, la risoluzione dell'equazione di Schroedinger per questo potenziale consente di replicare, in prima approssimazione, parte della struttura a shell e in particolare i primi numeri magici. Il vantaggio maggiore però è l'opportunità di conoscere la forma analitica degli autovalori e delle autofunzioni:

$$E_{nl} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right). \quad (2.9)$$

Nonostante le sue buone qualità tuttavia, il potenziale armonico presenta un andamento divergente per distanze superiori al raggio nucleare (vedasi Fig. 2.1), e questo non corrisponde a un caso fisico realistico. Un primo tentativo di migliorare questo aspetto può essere fatto approssimando il campo medio con una buca di potenziale, ma risultati più idonei si ottengono con il potenziale di Woods-Saxon⁴

$$v_{WS}(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R_N}{a_0}}}, \quad (2.10)$$

dove

$$V_0 = 51 \pm 33 \frac{N-Z}{N+Z} \text{ MeV} \quad (2.11)$$

indica la profondità della buca e il segno $\pm$ è $+$ nel caso di protoni, e $-$ nel caso di neutroni. In questo modo si tiene in considerazione la maggiore intensità

²Si noti che si è assunto un potenziale sferico, ma esistono anche applicazioni del potenziale di oscillatore armonico a nuclei deformati

³ Trovata confrontando il valore d'aspettazione del raggio quadratico medio nucleare con i dati sperimentali.

⁴ Woods e Saxon suggerirono il modello di un campo medio con una forma analoga a una funzione di Fermi. Per maggiori dettagli vedasi [5].

del legame p-n rispetto ai legami p-p ed n-n. Infatti si ha che, nel caso in cui si dovesse aumentare il numero di neutroni rispetto a quello dei protoni, il potenziale di cui risentono i primi rimarrebbe circa invariato, mentre il potenziale risentito dai protoni diverrebbe più profondo, proprio a causa della maggiore forza dell'interazione tra protoni e neutroni rispetto a quelle tra lo stesso tipo di nucleoni. Il segno nell'espressione della costante V_0 tiene dunque conto di questo effetto.

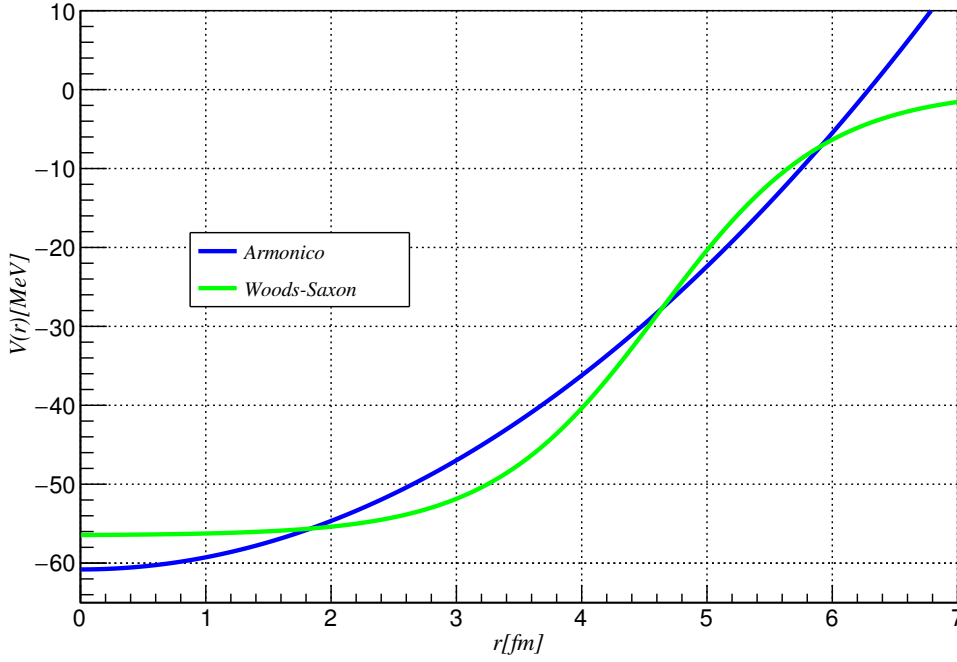


Figura 2.1: Differenze tra i potenziali ad oscillatore armonico e Woods-Saxon nel caso particolare del ^{48}Ca . È da notare la divergenza del primo per r molto grande.

Termine di Spin-Orbita In aggiunta al potenziale di Woods-Saxon bisogna aggiungere un termine che non sia di potenziale centrale, così da poter riprodurre in modo qualitativo la fenomenologia osservata sperimentalmente. In particolare, tutti i numeri magici vengono riprodotti solo qualora si aggiunga un termine risultante dall'interazione di spin-orbita.

Questa interazione, nel caso nucleare, non ha la stessa origine che nel caso atomico, ma è legata all'interazione forte e lo *splitting* generato in questo caso è dell'ordine dei MeV, proprio come le differenze tra le energie di particella singola. Le funzioni d'onda invece, non risultano particolarmente influenzate da questo termine.

Supponendo che il contributo di spin-orbita sia costituito da una costante di proporzionalità che moltiplica il prodotto degli operatori di momento angolare

2.1. IL CAMPO MEDIO NUCLEARE

e spin ($\mathbf{L.S}$), si ha che la costante sia proprio il gradiente del potenziale efficace, ovvero la derivata rispetto alla coordinata radiale per nuclei sferici [4]. In questo caso useremo la forma che si riferisce al potenziale di Woods-Saxon:

$$v_{SO}(r) = \frac{k_0 r_0^2}{r} \left[\frac{d}{dr} \frac{1}{1 + \exp \frac{r-R_n}{a_0}} \mathbf{L.S} \right] \quad (2.12)$$

dove $k_0 = 0.44V_0$ è a sua volta un'opportuna costante di proporzionalità.

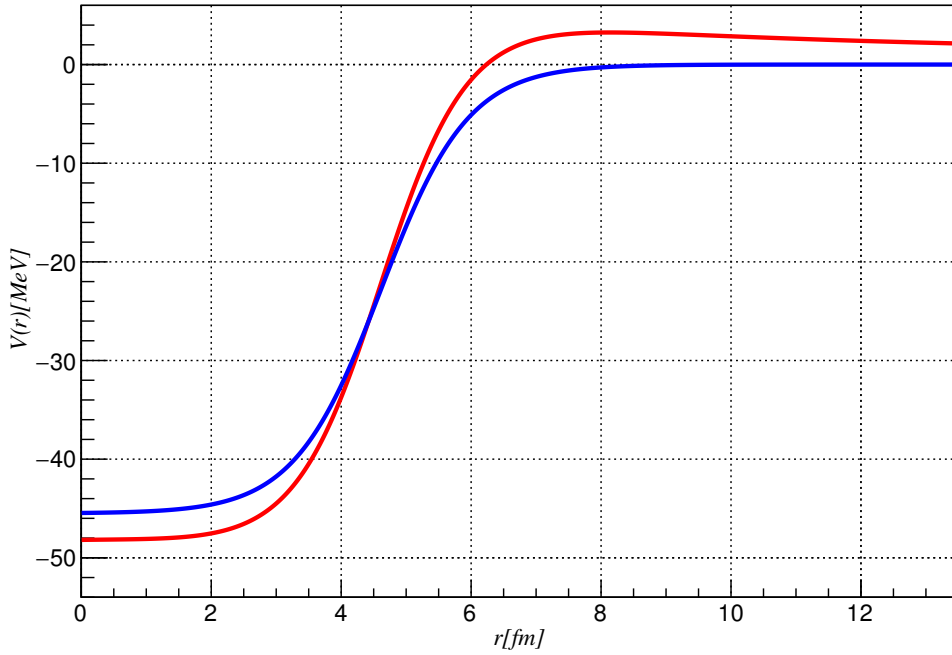


Figura 2.2: Potenziale di Woods-Saxon, nel caso del ^{48}Ca . In blu il potenziale per i protoni, compreso di contributo Coulombiano, in rosso il potenziale di Woods Saxon per i neutroni.

Contributo Coulombiano Nel caso delle interazioni tra protoni, oltre al termine di potenziale centrale e a quello di spin-orbita, è necessario considerare il contributo della forza elettromagnetica.

Partendo dal presupposto che la densità di carica all'interno del nucleo segua il potenziale centrale, si può trovare facilmente una forma analitica per l'interazione repulsiva tra protoni. In particolare, nello spirito della parametrizzazione di Woods-Saxon è comodo supporre che, così come il potenziale, anche la densità di carica abbia una distribuzione all'incirca uniforme. Inoltre dall'osservazione dell'effetto trascurabile che hanno i termini di superficie sulla forza Coulombiana, si può fissare la costante a_0 di diffusività ad un valore pari a zero.

Da queste considerazioni, e tenuto conto della normalizzazione che restituisce la carica totale, si ha che il potenziale Coulombiano nucleare può essere assimilato a quello di una sfera uniformemente carica di raggio R_n .

$$n_{ch}(r) = \frac{Zq_e}{\frac{4}{3}\pi R_n^3} \quad (2.13)$$

$$v_C(r) = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{Zq_e^2}{R_n} \left[3 - \left(\frac{r}{R_n} \right)^2 \right] & r \leq R_n \\ \frac{Zq_e^2}{r} & r > R_n \end{cases} \quad (2.14)$$

Migliori risultati si possono ottenere sostituendo ad R_n nella 2.14 il parametro R_U

$$R_U = R_n \sqrt{\frac{1 + (5s^2/2R_n^2)}{1 + (3s^2/4R_n^2)}} \quad (2.15)$$

con $s = 2.0$ fm, come suggerito da [6], allo scopo di riprodurre i risultati che si avrebbero scegliendo una distribuzione di Fermi per la carica nucleare.

2.2 Teoria del Funzionale Densità

I campi medi precedentemente illustrati forniscono una possibile descrizione della fenomenologia. Grazie alla teoria del funzionale densità, le cui basi saranno in seguito descritte, è inoltre possibile ricavare le densità nucleari in maniera più microscopica. L'ostacolo rappresentato dal fatto di non conoscere il funzionale "esatto" ma di avere solo delle parametrizzazioni derivate da specifiche approssimazioni, può essere superato se si tiene conto della possibilità di invertire questo procedimento: per i teoremi di Kohn e Sham, è garantita l'univocità della relazione tra densità e funzionale dell'energia; e questo tipo di approccio al problema beneficia dell'ampiezza di una teoria che ha applicazione più generale e meno empirica.

2.2.1 I Teoremi di Hohenberg e Kohn

A metà degli anni 60 del Novecento, furono pubblicati da parte di Hohenberg e Kohn gli articoli [7] in cui sono enunciati i teoremi che diedero inizio alla teoria del funzionale densità. La loro idea nacque con lo scopo di essere applicata allo studio di gas elettronici non omogenei, molecole o solidi nel loro stato fondamentale, ma il suo utilizzo vale a priori per tutti i sistemi composti da fermioni, tra i quali vi è il nucleo.

2.2. TEORIA DEL FUNZIONALE DENSITÀ

Il concetto principale è quello dell'applicazione di un principio variazionale per l'energia dello stato fondamentale in funzione della densità di probabilità:

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

Il primo teorema parte dalla considerazione di un insieme qualsiasi di fermioni in un recipiente molto esteso (in modo da rendere trascurabili gli effetti di superficie) e sotto l'effetto di un potenziale esterno $v(\mathbf{r})$ e di un'interazione reciproca tra le particelle.

Assumendo che lo stato fondamentale Ψ sia non degenere, la sua densità è

$$n(\mathbf{r}) := \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle \langle \Psi | \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \int dr_1 \dots dr_A |\Psi(r_1 \dots r_A)|^2, \quad (2.16)$$

dove N è una costante di normalizzazione.

Mostriamo che, a meno di una costante additiva, il potenziale $v(\mathbf{r})$ è un funzionale unico di $n(\mathbf{r})$.

Supponiamo esista un potenziale $v'(\mathbf{r})$, con *ground state* Ψ' , tale che la densità prodotta sia sempre $n(\mathbf{r})$. Ne segue che, a meno che $v(\mathbf{r}) - v'(\mathbf{r}) = \text{const}$, gli autostati Ψ e Ψ' non possono essere uguali, poiché risolvono due diverse equazioni di Schroedinger.

Indicando le Hamiltoniane e le energie dei *ground state* con H , H' ed E , E' , dalla proprietà di minimizzazione dello stato fondamentale si ricava

$$E' = \langle \Psi' | H' | \Psi' \rangle < \langle \Psi | H' | \Psi \rangle = \langle \Psi | H - V + V' | \Psi \rangle, \quad (2.17)$$

dove V rappresenta l'energia potenziale associata al campo esterno, tale che

$$E' < E + \int [v'(\mathbf{r}) - v(\mathbf{r})] n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.18)$$

Allo stesso modo, scambiando le quantità indicizzate con quelle senza indice si giunge ad affermare che

$$E < E' + \int [v(\mathbf{r}) - v'(\mathbf{r})] n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.19)$$

Sommando le 2.18 e 2.19 si giunge al seguente assurdo

$$E + E' > E + E'. \quad (2.20)$$

Da cui si ha che $v(\mathbf{r})$ è un funzionale unico di $n(\mathbf{r})$ a meno di una costante additiva. Infine, poiché H è determinato dal potenziale $v(\mathbf{r})$, l'intero sistema ha uno stato fondamentale che è funzionale unico di $n(\mathbf{r})$.

Da qui in avanti, onde distinguere l'energia E come valore d'aspettazione per una certa Hamiltoniana ed uno stato ψ , dal funzionale energia dipendente dalla densità, si userà la notazione $\mathcal{E}[n]$ per indicare quest'ultimo.

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

Si deduce dal primo teorema che così come l'energia dello stato fondamentale è un funzionale della densità, allo stesso modo deve esserlo la somma dell'energia cinetica con quella d'interazione.

A questo proposito si definisce una funzione universale $F[n(\mathbf{r})]$ che valga per un numero qualsiasi di particelle ed un potenziale arbitrario. A partire da questa, si può assegnare la seguente definizione per il funzionale dell'energia, considerato un certo potenziale esterno:

$$\begin{aligned} F[n(\mathbf{r})] &:= \langle \Psi | T + U | \Psi \rangle \\ \mathcal{E}_v[n] &:= \int v(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} + F[n] \end{aligned} \quad (2.21)$$

Questo, per la densità che descrive il sistema, corrisponde all'energia del *ground state* E .

Questo fatto si può mostrare innanzitutto prendendo in considerazione le sole densità che soddisfino la condizione di normalizzazione sul numero di particelle N

$$N[n] := \int n(\mathbf{r})d\mathbf{r} = N \quad (2.22)$$

Il funzionale dell'energia in Ψ' assume il suo minimo nel corretto stato fondamentale Ψ , ottenuto a partire da variazioni arbitrarie di Ψ' , mantenendo il numero di particelle costante.

$$\mathcal{E}_v[\Psi'] := \langle \Psi' | V | \Psi' \rangle + \langle \Psi' | T + U | \Psi' \rangle \quad (2.23)$$

In particolare se Ψ' è lo stato fondamentale associato ad un altro potenziale esterno $v'(\mathbf{r})$, si ha

$$\mathcal{E}_v[n'] > \mathcal{E}_v[n], \quad (2.24)$$

2.2. TEORIA DEL FUNZIONALE DENSITÀ

il che dimostra la validità del principio variazionale.

2.2.2 Le equazioni di Kohn-Sham

Circa un anno dopo la pubblicazione degli articoli [7], lo stesso Kohn insieme a Lu Jeu Sham scrissero un articolo [8] in cui la DFT venne resa più semplice da utilizzare.

L'idea principale è quella di rappresentare un generico sistema di fermioni interagenti tramite un sistema ausiliario in cui invece non interagiscono, ma mantengono la stessa densità $n(\mathbf{r})$. In questa approssimazione diventa più pratico associare a ciascun fermione un'autofunzione di particella singola $\psi(\mathbf{r})$, detta *orbitale di Kohn-Sham*, tenendo a mente che per la natura del sistema studiato la funzione d'onda totale corrisponderà a un determinante di Slater. In tal caso, la densità di probabilità associata è scritta come:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (2.25)$$

Il funzionale $F[n(\mathbf{r})]$ definito nella 2.21 può essere riscritto esplicitando i diversi contributi all'energia,

$$F[n] = T_{ni}[n] + E_{int}[n] \quad (2.26)$$

dove $T_{ni}[n]$ rappresenta l'energia cinetica di un sistema di particelle non interagenti, di densità $n(\mathbf{r})$, ed $E_{int}[n]$ è invece l'energia di interazione, a sua volta composta da un termine diretto, detto di Hartree E_H , e un termine di scambio e correlazione E_{xc} , che rappresenta l'interazione residua.

L'energia totale in questo modo diventa:

$$E[n] = T_{ni}[n] + E_{int}[n] + \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) \quad (2.27)$$

con $T_{ni}[n]$ riscrivibile come

$$T_{ni}[n] = \sum_i -\frac{1}{2} \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.28)$$

Il minimo del funzionale energia può essere trovato imponendo che la sua variazione si annulli:

$$\delta E = 0 \quad (2.29)$$

Inoltre è necessario aggiungervi un moltiplicatore di Lagrange per la condizione

di normalizzazione⁵

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

e la richiesta di ortonormalità delle autofunzioni⁶

$$\delta \left(E - \sum_i \epsilon_i \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right). \quad (2.30)$$

Eseguendo la variazione rispetto a ψ_i^* la 2.30 si può riscrivere

$$\frac{\delta}{\delta \psi_i^*} \left(\sum_i -\frac{1}{2} \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + E_{int}[n(\mathbf{r})] + \int v(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \sum_i \epsilon_i \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) = 0, \quad (2.31)$$

per infine ottenere le equazioni di Kohn-Sham:

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + \frac{\delta E_{int}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (2.32)$$

Definendo

$$\frac{\delta E_{int}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}) = v_{KS}(\mathbf{r}), \quad (2.33)$$

la 2.32 assume una forma del tipo equazione di Schroedinger

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + v_{KS} \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (2.34)$$

In questo modo v_{KS} è il potenziale efficace del sistema a cui si riducono le interazioni del problema iniziale qualora si eliminino quelle tra le particelle, mantenendo la densità costante. Ciò implica che il campo medio v_{KS} dipenda dalla densità come asserito dal primo teorema di Hohenberg e Kohn e che data una forma attendibile per $n[\mathbf{r}]$ sia a sua volta possibile risalire al potenziale efficace corrispondente.

Applicazione al caso nucleare Prima di applicare la teoria di Kohn e Sham al nucleo, è il caso di soffermarsi sulle caratteristiche che distinguono il sistema elettronico, per il quale la teoria è stata originariamente elaborata, dal sistema nucleare.

Il primo punto saliente è l'assenza di un potenziale esterno che mantenga legato il sistema nucleare. La presenza dell'interazione forte al suo interno infatti, fa di esso un sistema auto-legato, che si traduce nella mancanza del termine di potenziale

⁵ Corrispondente alla conservazione del numero di particelle.

⁶ Dal momento che si sta studiando un sistema di fermioni.

2.3. MASSA EFFICACE DEL NUCLEONE

esterno nella 2.33.

La seconda particolarità consiste nella diversità dei tipi di nucleoni, e quindi a loro volta, delle densità. Questo porterà alla generazione di orbitali di Kohn-Sham e potenziali efficaci distinti nei due casi.

2.3 Massa efficace del nucleone

L'esistenza di una relazione biunivoca tra il campo medio a cui il nucleo è soggetto e la sua densità, è confermata dal primo teorema di Hohenberg e Kohn. Questa trattazione può essere ulteriormente estesa con l'inclusione nel problema di un termine dipendente dal gradiente della densità, strettamente legato all'interazione tra nucleoni. Infatti, termini dell'interazione tra particelle, dipendenti dal momento relativo k , producono sul funzionale energia termini in $\nabla\rho$, $\nabla^2\rho$, ecc.

L'inclusione del termine dipendente dal gradiente si può tradurre con l'introduzione di una massa efficace m^* per i nucleoni, che all'interno del procedimento di inversione può avere effetti sulle energie di particella singola.

2.3.1 Campo medio dipendente dal momento

Il primo a dare una definizione della massa efficace nel caso non relativistico fu Victor Weisskopf nell'articolo [11]. Verrà brevemente illustrata la sua dimostrazione.

Si consideri una distribuzione uniforme di materia nucleare di A nucleoni, in cui A è molto grande in modo da trascurare gli effetti di bordo. In una trattazione a particelle indipendenti si possono fare le seguenti due osservazioni:

1. Se la repulsione Coulombiana fosse rimossa, un numero arbitrario e molto grande di nucleoni formerebbe una configurazione stabile, avente densità di probabilità e densità di energia indipendenti dal numero di particelle nel sistema.
2. L'effetto delle forze nucleari su una determinata particella può essere espresso sotto la forma di un'energia potenziale indipendente dalla posizione di tutte le altre particelle ma dipendente dalle sole coordinate del nucleone che risente dell'interazione.

Nel limite di materia nucleare infinita, questa energia potenziale sarebbe costante nello spazio e l'autofunzione totale sarebbe un prodotto di onde piane, dovutamente antisimmetrizzate, tali da soddisfare il principio di Pauli.

Gli A nucleoni risultano distribuiti su diversi livelli di indice α , e ognuno è caratterizzato da un momento p_α . Il massimo valore (in modulo) del momento, quello di Fermi p_F , e la sua energia cinetica T_F , sono determinati dalla densità ρ_0 . Se neutroni e protoni sono presenti in ugual misura si ottiene,

$$p_F = \hbar \left(\frac{3}{2} \pi^2 \rho \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (2.35)$$

$$T_F = \frac{p_F^2}{2m} \quad (2.36)$$

dove m è la massa del nucleone.

Una particella nel livello α è sotto l'influenza delle forze di tutte le altre particelle e questo può essere scritto in termini di un potenziale U_α , negativo e costante all'interno della materia nucleare. L'indice α indica la possibilità che l'energia potenziale possa dipendere dal livello α . Allora, per l'energia totale del sistema si ha:

$$E = \sum_{\alpha} T_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} U_{\alpha}, \quad T_{\alpha} = \frac{p_{\alpha}^2}{2m}. \quad (2.37)$$

Dalla 2.37 si ottiene un'espressione per la *packing fraction*⁷:

$$P = -\overline{T}_{\alpha} - \frac{1}{2} \overline{U}_{\alpha} \quad (2.38)$$

dove la barra indica il valor medio sugli stati α occupati.

Successivamente si determina l'energia di separazione S , che è l'energia necessaria per rimuovere una particella e lasciare il sistema residuo nel suo stato più basso. Ciò significa rimuovere una particella dal livello più alto $\alpha = F$ (F rappresenta un livello in cima alla distribuzione di Fermi).

$$S = -(T_F + U_F). \quad (2.39)$$

L'energia di separazione S è strettamente legata alla *packing fraction* P . Nel limite di un gran numero di particelle esse coincidono e questa è diretta conseguenza della prima osservazione fatta all'inizio del paragrafo: La rimozione di un numero n di particelle richiederebbe un'energia $n \times S$ e la differenza di energia tra il sistema iniziale e quello finale sarebbe $n \times P$, da cui $S = P$.

⁷ Data dal rapporto tra la differenza di massa $(M - A)$ e il numero di massa A , il tutto moltiplicato per 10^4 . È un indice della stabilità o instabilità di un nucleo o insieme di nucleoni.

2.3. MASSA EFFICACE DEL NUCLEONE

Dalle 2.38 e 2.39 si ottiene la seguente relazione:

$$2P - S = S = T_F - 2\bar{R}_\alpha - \bar{U}_\alpha + U_F. \quad (2.40)$$

in cui l'energia cinetica è nota, T_F è data dalla 2.36 e si dimostra facilmente che in un sistema di fermioni liberi nello stato fondamentale $\bar{T}_\alpha = (3/5)T_F$. Segue che:

$$S = -\frac{1}{5}T_F - \bar{U}_\alpha + U_F \quad (2.41)$$

Quest'ultima relazione mostra che U_α deve dipendere dallo stato α . Se così non fosse, S sarebbe negativa.

La più semplice funzione che può rendere esplicita la dipendenza di U_α da α è una di forma quadratica:

$$U_\alpha = U_0 + \frac{p_\alpha^2}{p_F^2} U_1, \quad (2.42)$$

con U_0 e U_1 costanti.

Esprimendo la dipendenza in termini di una massa efficace m^* :

$$\frac{p_\alpha^2}{2m} + U_\alpha = \frac{p_\alpha^2}{2m^*} + U_0 \quad (2.43)$$

La sostituzione dei valori sperimentali della densità e *packing fraction* restituiscono per il rapporto tra massa efficace e massa il valore:

$$\frac{m^*}{m} \approx 0.4 \quad (2.44)$$

sottostimato rispetto ai valori sperimentali noti $\approx 0.7 - 0.9$. Per ritrovare i dati empirici bisognerebbe considerare un'interazione tra le particelle che tenga conto di un termine a tre corpi⁸ [14].

2.3.2 m^*/m nell'equazione di Schroedinger

Un metodo alternativo di definire la massa efficace consiste nel considerare l'energia totale di particella singola nei suoi contributi cinetico e potenziale, partendo dal presupposto che quest'ultimo possa dipendere sia dal momento che dall'energia.

$$E = \frac{(\hbar k)^2}{2m} + v(k, E) \quad (2.45)$$

⁸ Termine che in realtà viene ottenuto tramite interazioni a due corpi in cui viene incluso un termine dipendente dalla densità. Queste interazioni infatti sono più facili da trattare rispetto a una vera interazione a tre corpi.

CAPITOLO 2. STRUMENTI TEORICI

L'introduzione di m^* nell'equazione di Schroedinger risulta agevolata se si operano delle semplificazioni sulla forma del potenziale. Supponendo che esso dipenda solo da k (e dalla coordinata radiale) si può scrivere l'energia totale sotto forma di contributo puramente cinetico nel modo seguente:

$$\frac{(\hbar k)^2}{2m} + v(k, r) = \frac{(\hbar k)^2}{2m^*} \quad (2.46)$$

per una certa massa efficace m^* .

Derivando la 2.46 rispetto a k , dividendola poi per $\hbar^2 k$ e moltiplicando per m , si giunge alla definizione del rapporto tra le due masse in funzione del momento:

$$\frac{m^*}{m} = \left(1 + \frac{m}{\hbar^2 k} \frac{\partial v(k, r)}{\partial k} \right)^{-1}. \quad (2.47)$$

Per scrivere m^* esplicitamente in funzione di r è necessario fare uso della relazione che lega la densità al momento

$$k(r) = \left(\frac{3}{2} \pi^2 \rho(r) \right)^{1/3}. \quad (2.48)$$

In tal modo, la massa efficace verrà inserita nell'equazione di Schroedinger sotto la forma del gradiente rispetto alla coordinata radiale della sua funzione inversa:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r \frac{1}{m^*(r)} \nabla_r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + v_{ext} \right] u(r) = Eu(r) \quad (2.49)$$

Tuttavia, per risolvere questa equazione è necessario rendere esplicito il termine $\nabla_r(1/m^*(r))$ attraverso la sua dipendenza dalla densità. Svolgere questa operazione implica supporre una forma per l'andamento di m^* , o più precisamente, per la dipendenza del potenziale efficace, da $\rho(r)$; che però non è nota a priori.

Nell'impossibilità di adoperare l'approccio sopra descritto, un secondo tentativo di studiare gli effetti dell'introduzione della massa efficace nell'equazione di Schroedinger può essere fatto supponendo una dipendenza del potenziale dall'energia, e non più dal momento. Non essendo nota la forma esplicita, si può supporre che l'energia agisca in modo da non modificare la parte centrale del potenziale, e il modo migliore di scrivere una tale dipendenza è tramite un'espansione in serie di potenze, limitata in questo caso al primo ordine:

$$V(r, E) = V_0(r) + \left(1 - \frac{m^*}{m} \right) E \quad (2.50)$$

2.3. MASSA EFFICACE DEL NUCLEONE

In tal caso l'equazione di Schroedinger può essere scritta come

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\nabla_r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) + \left(E - \frac{m^*}{m} V_0 \right) u(r) = 0 \quad (2.51)$$

Tale che m^* non sia più presente soltanto al denominatore del termine cinetico, ma generi un riscaldamento del potenziale V_0 .

Capitolo 3

Applicazione del Modello

3.1 Equazione di Schroedinger

Il primo problema da affrontare riguarda la ricerca della soluzione dell'equazione di Schroedinger del singolo nucleone per un determinato potenziale esterno $v_{ext}(r)$.

Supponendo di considerare sistemi non deformati, le proprietà di simmetria permettono di sfruttare l'uso delle coordinate sferiche per fattorizzare l'autofunzione totale $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$. In questo modo è possibile separare l'equazione del problema tridimensionale originale, in tre equazioni del secondo ordine e indipendenti per i moti di r , θ e ϕ rispettivamente.

In particolare definendo $u(r)$ l'autofunzione che risolve l'equazione relativa al moto radiale, si ha:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + \frac{l(l+1)\hbar}{2mr^2} + v_{ext}(r) \right] u(r) = Eu(r) \quad (3.1)$$

dove,

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) \quad (3.2)$$

con condizioni al contorno,

$$\lim_{r \rightarrow 0} u(r) \propto r^{l+1} \quad \lim_{r \rightarrow 0} u'(r) \propto (l+1)r^l \quad (3.3)$$

La risoluzione della 3.1 richiede di trovare contemporaneamente autofunzioni e autoenergie del sistema. Per questo motivo è necessario trovare una condizione soddisfatta dall'autofunzione qualora si risolva l'equazione con il corretto autovalore corrispondente.

È noto che in prima approssimazione il potenziale nucleare è assimilabile ad una buca di potenziale, e che al di fuori di essa le autofunzioni del problema

sono esponenzialmente sopresse a 0. In questo modo si è a conoscenza di una condizione al contorno per le autofunzioni, ovvero che, se l'equazione di Schroedinger è integrata fino a un raggio $rmax$ ¹, si ha:

$$|u(rmax)| < \epsilon, \text{ dove } \epsilon \text{ è fissato a } 10^{-8}. \quad (3.4)$$

Si è scelto di risolvere l'equazione 3.1 per un dato autovalore E con il metodo di integrazione di Runge-Kutta al quarto ordine, con passo h fisso, dipendente dal tipo di dati trattati e dalla loro precisione. Per i potenziali con forma analitica quali quello armonico e il potenziale di Woods-Saxon $h = 0.005fm$.

3.1.1 Algoritmo di *Shooting*

Autovalori e autofunzioni per la particella singola vengono trovati con un algoritmo di *Shooting*[15][16]. Esso associa per tentativi a un autovalore la rispettiva autofunzione e successivamente effettua su quest'ultima la verifica di una proprietà che la possa identificare come soluzione della 3.1 (ovvero la 3.4).

Il metodo qui impiegato consiste nel risolvere la 3.1 per due autovalori di prova iniziali (E_1 ed E_2). Ottenute le relative autofunzioni è possibile capire quanto esse siano vicine alla funzione d'onda cercata, confrontando i valori esse che assumono in $r = rmax$:

- Se in $rmax$ le due autofunzioni dovessero essere discordi, il valore corretto dell'energia per quel livello dovrà trovarsi necessariamente tra E_1 ed E_2 .

A partire da qui, il modo per avvicinarsi e infine trovare l'autofunzione che si cerca, è quello di effettuare una *bisezione* sull'intervallo degli autovalori di prova. Avviare questo procedimento significa trovare il valor medio delle due energie, E_3 , e risolvere la 3.1 a partire da esso. A seconda del valore che assume la rispettiva autofunzione in $rmax$ bisognerà sostituire con E_3 , l'energia (E_1 o E_2) che ha autofunzione concorde alla terza rinvenuta, quando valutata in $rmax$.

Il procedimento di bisezione è da iterare fino a quando non venga soddisfatta la condizione al contorno 3.4 da una delle due autofunzioni ricavate ad ogni passaggio.

- Nel caso in cui invece la coppia di energie non dovesse fornire autofunzioni discordi in $rmax$, le soluzioni sono da cercare in un altro intervallo di energie.

¹ Che in questa trattazione corrisponde a un valore pari a tre volte il raggio del nucleo.

3.1. EQUAZIONE DI SCHROEDINGER

Nello scrivere l'algoritmo tuttavia, bisogna tenere conto di alcuni accorgimenti:

- L'equazione di Schroedinger non contiene una dipendenza esplicita dal numero quantico n , ma solo da l (o l e j nel caso di inclusione del termine di spin-orbita). Perciò quando si scelgono le energie $E1$ ed $E2$ di partenza, partendo dal presupposto di non conoscere l'intervallo in cui si trova l'autovalore corretto, conviene valutarle procedendo per intervalli ordinati, partendo dal fondo del potenziale.

In questo modo per la prima *shell* si inizierà la valutazione dal valore più negativo verso quelli positivi, e per i livelli successivi si escluderanno i primi valori più negativi. Questo modo di procedere velocizza leggermente l'algoritmo e aiuta a non incappare in errori, come lo scambio di energie e autofunzioni di due livelli con stessi l e j ma diverso n .

Per questo motivo è comunque necessario accompagnare a questo procedimento una funzione di conteggio dei nodi, che possa verificare che le autofunzioni e autoenergie generate una volta soddisfatta la condizione di convergenza, corrispondano effettivamente al livello di n scelto.

- Quando si risolve l'equazione di Schroedinger per un'energia data e si ha $l = 0$, bisogna modificare la condizione al contorno imposta sulla derivata prima in prossimità dell'origine, ponendola pari a zero. Trascurare questa condizione non ha effetti apprezzabili sulle autoenergie trovate, ma cambia i valori assunti dall'autofunzione, che vicino all'origine presenta un asintoto verticale, con conseguenze sulle densità di probabilità che ne derivano.

- Per alcuni nuclei (ad es. ^{208}Pb) il normale ordinamento delle *shell* può cambiare, e certi livelli con energie molto vicine possono scambiare la loro posizione rispetto all'ordinamento tradizionale.

Si è visto che, procedendo come descritto nel punto precedente, onde ricavare i valori di energia corretti era necessario, per ogni livello successivo al primo, iniziare l'algoritmo di *Shooting* in un intervallo di energie che contenesse sia l'energia calcolata per la *shell* precedente che le energie minori in un intervallo di un paio di MeV.

Questo metodo risulta funzionare in modo corretto fin quando, sempre nel caso di nuclei pesanti, non si debba ripetere l'intero algoritmo sullo stesso nucleo più volte (ovvero, quando viene introdotto l'algoritmo di inversione -che sarà descritto successivamente- in cui il problema diretto viene più volte risolto a partire da potenziali efficaci leggermente diversi). Per risolvere questo problema si è scelto di dare in ingresso al programma un intervallo

di energie di partenza già vicine al valore atteso.

Questo provvedimento porta con sé anche il vantaggio di velocizzare notevolmente l'algoritmo nel suo complesso.

Dopo aver trovato le autofunzioni di particella singola per tutti i nucleoni si procede a normalizzarle, di modo che le densità da essere ricavate tramite:

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\alpha} (2j + 1) u_{\alpha}^2(r) \quad (3.5)$$

siano a loro volta normalizzate al numero di particelle.

Per tutti gli integrali in questo algoritmo e nei successivi si usa il metodo dei trapezoidi, con passo h pari a quello usato nel metodo di Runge-Kutta.

3.1.2 Test

Potenziale Armonico Si può fare un primo test della validità dell'algoritmo di *Shooting*, usando come potenziale esterno il potenziale armonico 2.7, del quale sono note le autoenergie 2.9.

In tabella vi sono gli autovalori ricavati per i neutroni nel caso $A = 48$, che risultano corretti fino alla quarta cifra significativa.

Tabella 3.1: *Autovalori Oscillatore Armonico*

n	l	E_{esatta}	$E_{shooting}$
0	0	1.5	1.49983
0	1	2.5	2.50021
0	2	3.5	3.50069
1	0	3.5	3.50084
0	3	4.5	4.50123

Potenziale di Woods-Saxon Il potenziale iniziale nel metodo iterativo per l'inversione delle equazioni di Kohn-Sham è quello di Woods-Saxon 2.10. Questa si rivela una scelta valida, perché la convergenza dell'algoritmo è garantita se il potenziale di partenza non si discosta notevolmente dal potenziale efficace di arrivo.

In seguito sono presentate le autofunzioni e gli autovalori ricavati dalla risoluzione dell'equazione di Schroedinger col metodo di *Shooting* per il ^{40}Ca , usando come potenziale esterno il potenziale di Woods-Saxon 2.10 comprensivo di contributo Coulombiano 2.14 (nel caso di protoni) e di Spin-Orbita 2.12.

3.1. EQUAZIONE DI SCHROEDINGER

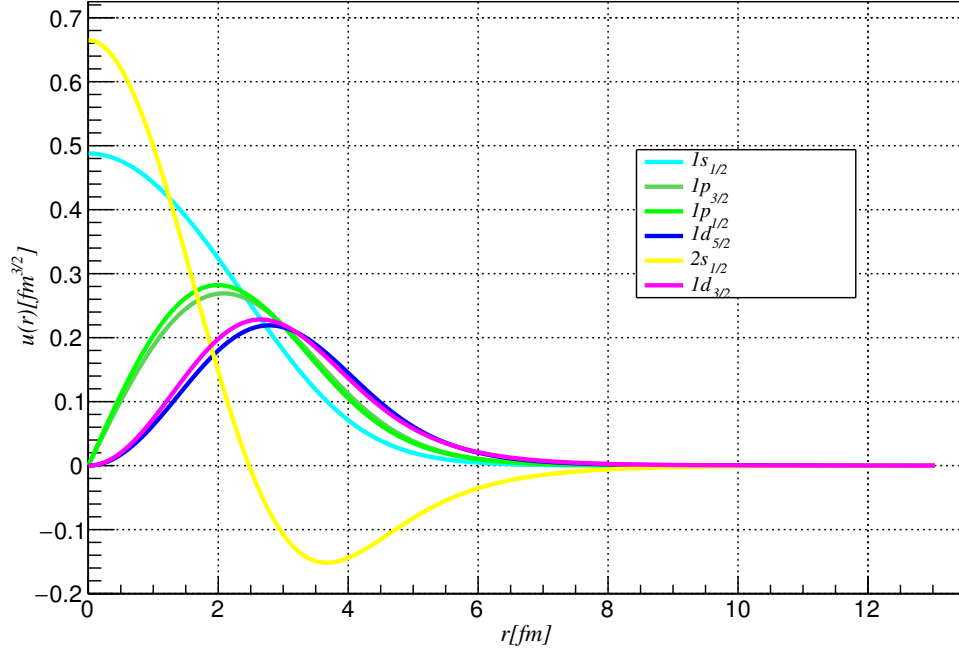


Figura 3.1: Autofunzioni per neutroni del ^{40}Ca .

<i>Shell</i>	E_{protoni} (MeV)	E_{neutroni} (MeV)
$1s_{1/2}$	-30.8947	-38.8448
$1p_{3/2}$	-21.9811	-29.5433
$1p_{1/2}$	-19.3286	-26.9456
$1d_{5/2}$	-12.4296	-19.6143
$2s_{1/2}$	-8.4931	-15.6831
$1d_{3/2}$	-7.07519	-14.3121

Tabella 3.2: Energie per protoni e neutroni del ^{40}Ca con potenziale di Woods-Saxon

I valori delle energie sono stati confrontati con quelli ottenuti numericamente da [2] per il potenziale di Woods-Saxon. I risultati coincidono fino alla quarta cifra significativa nel caso dei neutroni. Per quanto riguarda i protoni invece, la differenza -in valore assoluto- con le energie presenti in [2] non supera 1 MeV, e i dati determinati col presente algoritmo hanno modulo maggiore. Una plausibile spiegazione può essere trovata nella sostituzione in questo caso di R_U ad R_n nella forma analitica del potenziale Coulombiano.

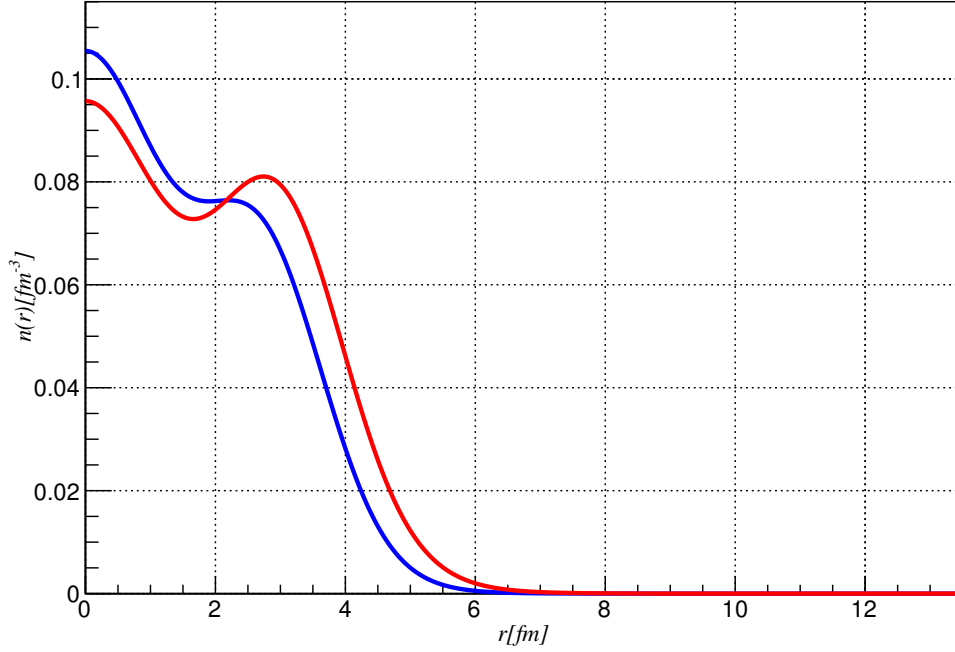


Figura 3.2: Densità teoriche per protoni (blu) e neutroni (rosso) nel caso del ^{48}Ca ottenute tramite la 3.5 per il potenziale di Woods-Saxon.

3.2 Inversione delle equazioni di Kohn-Sham

Le equazioni di KS per il problema inverso della DFT erano state scritte precedentemente (2.34). Per comodità vengono qui riportate:

$$\varepsilon_j \phi_j(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v_{KS}([n], \mathbf{r}) \right] \phi_j(\mathbf{r}) \quad (3.6)$$

Il metodo di inversione scelto è quello proposto da Van Leeuwen e Baerends in [18] per l'applicazione in ambito atomico. L'algoritmo è iterativo e genera un potenziale efficace ad ogni iterazione in dipendenza di una densità *target*² e del potenziale generato nell'iterazione precedente.

Il punto di partenza per trovare la forma analitica finale per i potenziali $v^k(\mathbf{r})$, dove k è indice di iterazione, è la 3.6. Ogni singola equazione è moltiplicata per ϕ_j^* su entrambi i lati, dopodiché sono tutte raggruppate in una sommatoria sulle j

² Le densità *target* sono densità note e indipendenti dall'algoritmo. Esse possono essere di origine sperimentale o numerica, e sono il termine di confronto per le densità ricavate dalle autofunzioni generate con l'inversione delle equazioni di Kohn-Sham. Nella sezione 3.3 saranno definite in modo più approfondito.

3.2. INVERSIONE DELLE EQUAZIONI DI KOHN-SHAM

che poi si divide per la densità *target* (sperimentale o teorica). Si ottiene:

$$v(\mathbf{r}) = \frac{1}{n(\mathbf{r})} \sum_{j=1}^N \phi_j^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_j(\mathbf{r}) + \epsilon_j |\phi_j(\mathbf{r})|^2 \quad (3.7)$$

Si giunge allo schema iterativo ponendo la densità nota $n(\mathbf{r})$ al denominatore e iterando fino alla convergenza:

$$v^{k+1}(\mathbf{r}) = \frac{\rho^k(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} v^k(\mathbf{r}). \quad (3.8)$$

In questo modo $v^{k+1}(\mathbf{r})$ incrementa nelle regioni in cui $\rho^k(\mathbf{r}) > n(\mathbf{r})$ e decresce invece nelle regioni in cui $\rho^k(\mathbf{r}) < n(\mathbf{r})$. Il processo si ferma quando,

$$\max_r |\rho^k(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r})| < \epsilon \quad (3.9)$$

per un ϵ desiderato.

Inoltre bisogna tenere conto che questo schema è sensibile al potenziale di partenza e che è utile introdurre l'uso di un prefattore per evitare forti oscillazioni del potenziale. Esso si sceglie imponendo la condizione:

$$1 - \delta < \gamma \left(\frac{\rho^k(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \right) < 1 + \delta \quad (3.10)$$

ad esempio con $\delta \approx 0.05$ e dove γ è il prefattore.

L'articolo [18] sottolinea che in questa procedura bisogna essere certi che il potenziale sia zero all'infinito, perché altrimenti potrebbe non essere raggiunta la convergenza. Questo è dovuto al fatto che si può aggiungere una costante arbitraria sia al potenziale che alle densità di particella singola senza cambiare la densità.

A questo proposito [18] suggerisce una strada alternativa, che esclude l'imposizione di condizioni al contorno per il potenziale e lo incrementa o attenua a seconda della densità, come faceva anche la 3.8:

$$v^{k+1}(\mathbf{r}) = v^k(\mathbf{r}) + \gamma \frac{\rho^k(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \quad (3.11)$$

L'adattamento al caso nucleare si ottiene considerando la natura attrattiva del potenziale subito dai nucleoni. Infatti lo schema considerato finora, ad ogni

iterazione produce le seguenti variazioni per il potenziale:

$$\begin{aligned} \text{se } \rho^k(\mathbf{r}) > n(\mathbf{r}) &\Rightarrow v^{k+1}(\mathbf{r}) > v^k(\mathbf{r}), \\ \text{se } \rho^k(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) &\Rightarrow v^{k+1}(\mathbf{r}) = v^k(\mathbf{r}), \\ \text{se } \rho^k(\mathbf{r}) < n(\mathbf{r}) &\Rightarrow v^{k+1}(\mathbf{r}) < v^k(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Nel caso nucleare vogliamo che si verifichi il contrario, e questo avviene se invece si scrive:

$$v^{k+1}(\mathbf{r}) = v^k(\mathbf{r}) + \gamma \frac{n(\mathbf{r}) - \rho^k(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})}. \quad (3.12)$$

Per quanto riguarda le zone in cui eventualmente prevale la repulsione Coulombiana (potenziale positivo) vale ancora l'algoritmo originale. Perciò infine si avrà:

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

In cui il prefattore γ è stato a sua volta adattato, in modo da soddisfare una condizione analoga alla 3.10,

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

Se invece non ci si volesse avvalere del suggerimento di Jensen e Wasserman, l'equazione originale, adeguata al caso nucleare sarebbe:

$$v^{k+1}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \left(2 - \frac{\rho^k(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \right) v^k(\mathbf{r}) & v^k(\mathbf{r}) < 0 \\ \frac{\rho^k(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} v^k(\mathbf{r}) & v^k(\mathbf{r}) \geq 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

Verifica dell'algoritmo Una prima prova della validità dell'algoritmo può essere fatta imponendo come densità "esatta", la stessa densità teorica ricavata dalla risoluzione del problema diretto per il potenziale di Woods-Saxon. Ci si aspetta che il potenziale ricavato da questa densità sia lo stesso Woods-Saxon che l'ha generata.

L'algoritmo funziona sia nel caso in cui si usi il suggerimento dell'articolo per potenziali qualsiasi 3.13, sia che si usi l'equazione che necessita di una condizione al contorno per il potenziale 3.15.

3.3. DENSITÀ

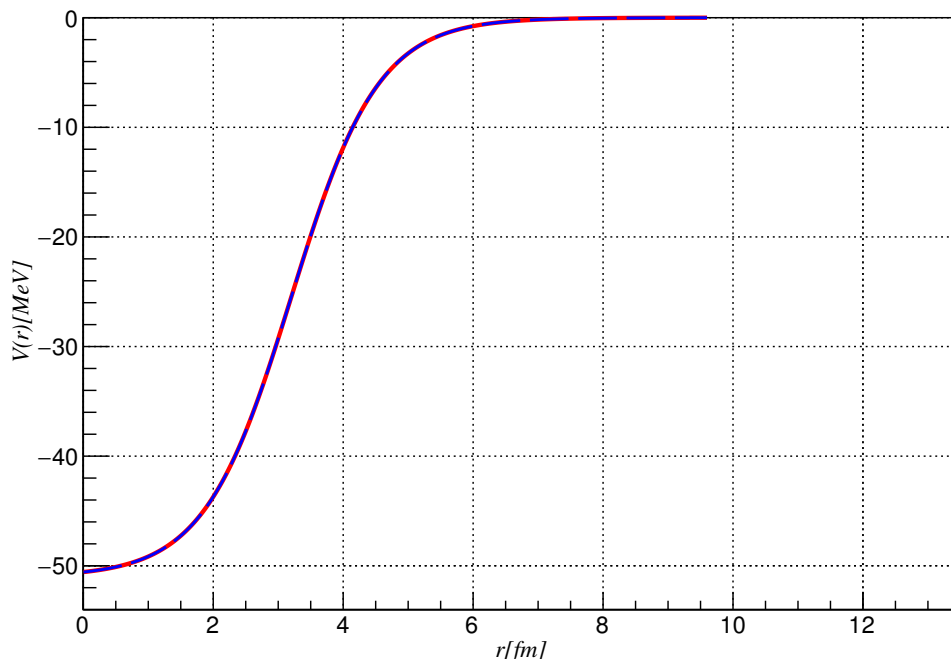


Figura 3.3: Sovrapposizione del potenziale Woods-Saxon di partenza e di quello ottenuto dall'inversione per i neutroni dell' ^{16}O , a partire da una densità nota data da quella teorica.

3.3 Densità

È doveroso fare un breve cenno alla teoria che sta alla base dell'estrazione delle densità dai dati sperimentali, giustificare la loro parametrizzazione, nonché elencare altri tipi di densità che sono stati inseriti nell'algoritmo come ulteriore test e verifica.

3.3.1 Densità Parametrizzate

La maggior parte di dati sperimentali a disposizione provengono da esperimenti di *scattering* di elettroni [20], per cui non sono date densità di probabilità ma bensì densità di carica.

Il vantaggio di usare elettroni per investigare la struttura nucleare giace soprattutto nel fatto che l'interazione elettrone-nucleo è nota e, in particolare, debole. Per questo motivo gli effetti di *scattering* multiplo possono essere trascurati e il processo di *scattering* descritto in termini perturbativi. La natura perturbativa dell'interazione, a sua volta, permette di porsi nella *Plane Wave Born Approximation* (PWBA), in cui, in simmetria sferica si ha

$$\frac{d\sigma(q)}{d\Omega} = \sigma_M |F(q)| \quad (3.16)$$

dove σ_M è la sezione d'urto di Mott [25], q il momento trasferito nello *scattering* ed $F(q)$ il fattore di forma nucleare:

$$F(q) = 4\pi \int_0^\infty r \frac{\sin(qr)}{q} n(r) dr. \quad (3.17)$$

La 3.17 non è che la trasformata di Fourier della densità. Antitrasformandola, è possibile ottenere una forma analitica per le densità di carica, ovvero

$$n(r) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty q \frac{\sin(qr)}{r} F(q) dq. \quad (3.18)$$

L'analisi dei dati provenienti dagli esperimenti di *scattering* è limitata dalla possibilità di studiare un intervallo finito di momenti trasferiti (da q_{min} a q_{max}). Di conseguenza, possono essere ricavate dai dati solo le ampiezze delle componenti di Fourier di $n(r)$, con lunghezze d'onda comprese tra $2\pi/q_{max}$ e $2\pi/q_{min}$.

Inoltre, per via del fatto che sono disponibili dati solo per le densità dei protoni, è necessario limitarsi allo studio della sola parte protonica nei casi in cui il nucleo non abbia $N = Z$. Nei casi in cui invece questa condizione valga, supponiamo che la densità per i protoni sia uguale a quella dei neutroni.

Sum of Gaussians Una parametrizzazione che si è scelto di utilizzare è di tipo *model-independent*, e parte dal presupposto che la distribuzione di densità di carica possa essere espansa su una base ortonormale $P_n(r)$.

$$n(r) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n P_n(r) \quad (3.19)$$

in cui i coefficienti A_n sono fissati in modo da riprodurre la sezione d'urto.

La parametrizzazione qui scelta è quella denominata *Sum of Gaussians*, dovuta a parametrizzata in [19]. La scelta di questa parametrizzazione risulta la più idonea poiché in prima approssimazione il potenziale di campo medio nucleare è assimilabile ad un potenziale armonico, le cui autofunzioni per grandi r presentano un andamento di tipo gaussiano, e di conseguenza anche le densità di probabilità.

Per le densità di carica si ha:

$$n(r) = \frac{1}{2\pi^{3/2}\gamma^3} \sum_i A_i \left\{ e^{-\left(\frac{r-R_i}{\gamma}\right)^2} + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\gamma}\right)^2} \right\} \quad (3.20)$$

3.3. DENSITÀ

dove gli A_i sono definiti da

$$A_i = \frac{ZQ_i}{1 + 2\frac{R_i^2}{\gamma}} \quad (3.21)$$

e i parametri R_i e Q_i sono riportati in [19] per una gran varietà di nuclei e in particolare i parametri Q_i indicano la frazione di carica contenuta nell' i -esima gaussiana tale che

$$\sum_i Q_i = 1. \quad (3.22)$$

La larghezza delle gaussiane invece è

$$\gamma = \left(\frac{2}{3} \langle r^2 \rangle \right)^{1/2} \quad (3.23)$$

dove r è il raggio quadratico medio dei nuclei in esame. Questa densità di carica risulta correttamente normalizzata a Ze .

Per ricavare la densità di probabilità dalla densità di carica bisogna tenere conto del fattore di forma del protone, e dal fatto che nello spazio di Fourier la trasformata della densità di probabilità è data dal rapporto tra le trasformate della densità di carica e del fattore di forma. Se si considera il fattore di forma del protone come descritto da una distribuzione gaussiana di larghezza $\alpha = \left(\frac{2}{3} \langle r_p^2 \rangle \right)^{1/2}$ si ottiene infine per i protoni (da normalizzare successivamente a Z):

$$n(r) = \frac{1}{2\pi^{3/2}r} \sum_i A_i \left\{ e^{-\left(\frac{r-R_i}{\beta}\right)^2} \left[\frac{r+R_i}{\beta^3} - \frac{R_i}{\beta\gamma^2} \right] + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\beta}\right)^2} \left[\frac{r-R_i}{\beta^3} + \frac{R_i}{\beta\gamma^2} \right] \right\} \quad (3.24)$$

con $\beta = \sqrt{\gamma^2 - \alpha^2}$

Fermi A partire dalle densità *SOG* si può ricavare un'ulteriore parametrizzazione, quella di Fermi a tre parametri, della forma:

$$n_F(r) = \frac{c_0}{1 + e^{\frac{r-c_1}{c_2}}} \quad (3.25)$$

La ri-parametrizzazione è ottenuta tramite un *fit* del grafico della relativa densità *SOG* usando il software *ROOT*.

3.3.2 Densità da Simulazioni di tipo Montecarlo

Per nuclei leggeri, quali l' ^{16}O e il ^{40}Ca , è possibile ottenere delle densità tramite metodi variazionali o Monte Carlo [24].

Una caratteristica di queste densità è quella di poter riprodurre adeguatamente gli spettri dei nuclei leggeri per lo stato fondamentale e i primi stati eccitati, grazie all'introduzione di forze a tre corpi.

Il calcolo avviene a partire da un potenziale nucleone-nucleone realistico a cui si possono aggiungere dei termini a tre corpi. A partire dai dati noti per i sistemi legati (come il deutone o l' ^3He) e da quelli provenienti dagli esperimenti di *scattering*, questi potenziali presentano una dipendenza da una serie di parametri liberi. In particolare, dagli esperimenti di *scattering* è possibile risalire alle sezioni d'urto dei processi p-p o p-n a varie energie³ e quindi ai dati relativi agli sfasamenti. In questo modo, più di tremila dati vengono fittati al fine di produrre un potenziale che rappresenti al meglio i dati sperimentali.

Nello studio eseguito da [22] il potenziale a due corpi viene chiamato *Argonne v18*, mentre quello a tre corpi, *Urbana X*. A seconda del potenziale usato nel calcolo numerico si ottengono due diverse densità, la prima, corrispondente al potenziale a due corpi *AV18* e la seconda dovuta all'uso congiunto dei due potenziali, *AV18+UIX*.

³La soglia energetica per gli esperimenti di *scattering* è di 350 MeV. Questa energia rappresenta il limite del canale elastico, infatti un'eccitazione del sistema nucleo può avvenire solo qualora venga prodotta una nuova particella a seguito dell'urto, che avviene alla soglia di produzione del pione.

Capitolo 4

Risultati: Potenziali

In questo capitolo si presenteranno i risultati dell'applicazione dell'algoritmo di inversione per i nuclei di ^{16}O , ^{40}Ca e ^{208}Pb (solo protoni). I primi risultati sono relativi ai potenziali efficaci ricavati a partire dalle diverse parametrizzazioni delle densità sperimentali e dalle densità teoriche ricavate tramite metodi Monte Carlo. Successivamente nel capitolo 6, si studierà l'effetto dell'introduzione della massa efficace sui livelli energetici di particella singola.

Alcuni commenti preliminari Prima di riportare gli esiti è bene fare qualche considerazione generale, onde evidenziare i punti in comune o le differenze più salienti, che possono essere utili per una più facile lettura dei risultati.

- Nella sezione 3.2 è stato mostrato il metodo di inversione delle equazioni di Kohn-Sham, e in particolare sono state scritte due diverse espressioni (3.13 e 3.15) per il potenziale efficace di indice $k + 1$ nel processo iterativo.

Una prima prova a partire dalle densità parametrizzate *SOG* ha mostrato che l'espressione 3.13 (derivata dal suggerimento dell'articolo [18], per evitare la costrizione delle condizioni al contorno per il potenziale) risulta la meno adatta ad essere utilizzata in questo frangente, sia da un punto di vista computazionale che dei risultati. Nella prova effettuata per i protoni del ^{40}Ca la 3.15 è stata in grado di soddisfare la condizione di convergenza in una decina di iterazioni¹, mentre la 3.13 è stata circa 25 volte più lenta. In più i potenziali efficaci derivati da questa espressione hanno andamenti molto irregolari sulle code.

Per questo motivo si è deciso di utilizzare unicamente l'espressione 3.15.

¹Le prime prove dell'algoritmo di inversione sono quelle più lente, perché fanno uso dell'algoritmo di *Shooting* privo della correzione che fornisce in ingresso l'intervallo "corretto" per le energie di particella singola (si riveda pagina 21).

- A prescindere dall'espressione scelta per v_{k+1} , la condizione di convergenza per l'algoritmo di inversione è data dalla 3.9; ed essa, determinando la precisione con cui la densità di uscita si avvicina alla densità *target*, influisce inevitabilmente sull'accuratezza dei risultati ottenuti.

Si osserva che densità sperimentali più precise, derivate dalla parametrizzazione di un gran numero di dati, permettono di ottenere potenziali efficaci corrispondenti a densità che si discostano da quella *target* per l'1% del valore massimo che queste ultime assumono². Altre densità sono in grado di fornire risultati soltanto sotto la condizione di una minore precisione. Questo sarà affrontato nel dettaglio successivamente.

- Nel ricavare i potenziali efficaci, per via della loro dipendenza dalla precisione richiesta dalla 3.9, si è cercato di variare ϵ in modo che i risultati per le energie di particella singola fossero più vicini ai dati sperimentali [9] [4], o che almeno rassomigliassero ad altre energie calcolate numericamente per il potenziale di Woods-Saxon [2].

- Ulteriore parametro di misura per un buon esito, oltre alle forme dei potenziali e alle energie di particella singola, è il tempo di convergenza.

L'algoritmo di *Shooting* è di per sé un algoritmo piuttosto lento, in particolare per nuclei pesanti quali il ^{208}Pb . Eseguire il procedimento di inversione implica dover risolvere il problema diretto più volte, e perciò le densità *target* migliori saranno quelle che comporteranno un minore tempo di convergenza e minore costo computazionale, oltre che risultati più precisi. Di solito una di queste condizioni porta come conseguenza l'altra.

4.1 Densità parametrizzate SOG

I primi potenziali efficaci ottenuti dall'inversione, sono quelli relativi ai nuclei più leggeri, ^{16}O e ^{40}Ca , in cui la densità nota è quella ottenuta dalla parametrizzazione in *SOG*.

² Ad esempio, nel caso del ^{16}O e del ^{40}Ca i valori massimi assunti dalle densità con parametrizzazione SOG sono in entrambi i casi uguali a circa 0.1fm^{-3} . Imponendo nella 3.9 che sia $\epsilon = 0.001\text{fm}^{-3}$ (l'un percento di 0.1fm^{-3}), l'algoritmo raggiunge la convergenza e restituisce valori più vicini a quelli sperimentali per quanto riguarda le energie di particella singola, rispetto a quelli che si ottengono imponendo ad ϵ un valore più grande.

4.1. DENSITÀ PARAMETRIZZATE SOG

Nucleo: ^{16}O

Questo nucleo raggiunge la convergenza per $\epsilon = 0.001 \text{ fm}^{-3}$. Sotto questa condizione si ottengono con meno di una decina di iterazioni, potenziali efficaci a cui corrispondono energie di particella singola, per le *shell* più esterne, che si discostano dai valori sperimentali per meno di 1 MeV.

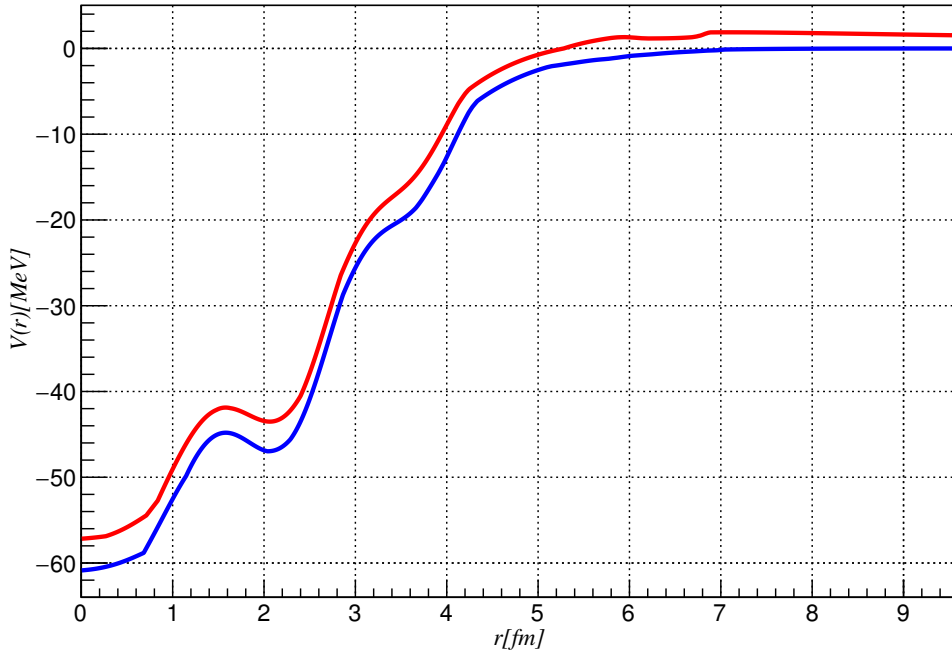


Figura 4.1: Potenziale efficace SOG per ^{16}O ed $\epsilon = 0.001 \text{ fm}^{-3}$. In rosso il potenziale per i protoni, in blu quello per i neutroni

I valori delle energie di singola particella si avvicinano ancora di più ai valori sperimentali se si incrementa la precisione richiesta dalla condizione di convergenza: $\epsilon = 0.0001 \text{ fm}^{-3}$. L'algoritmo risulta nettamente più lento rispetto al caso precedente, raddoppiando il tempo di esecuzione. In questo caso tuttavia, nonostante le energie presentino dei miglioramenti, l'andamento del potenziale sulle code è poco regolare e presenta parti segmentate che non trovano spiegazione fisica.

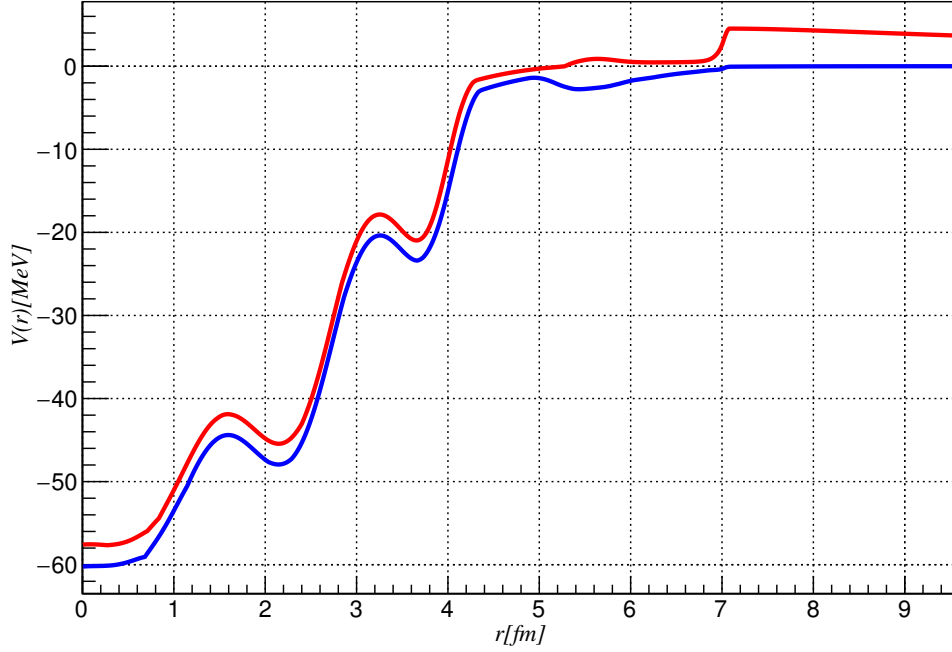


Figura 4.2: Potenziale efficace SOG per ^{16}O ed $\epsilon = 0.0001 \text{ fm}^{-3}$. In rosso il potenziale per i protoni, in blu quello per i neutroni

Si ritiene inopportuno fare un ulteriore *fit* delle code per ritrovare l'andamento noto per grandi r . Infatti, si pensa che le irregolarità sulle code siano dovute unicamente alla variazione della precisione sulla condizione di convergenza 3.9, e che non rispecchino altro che l'esito dell'applicazione di questo preciso algoritmo d'inversione. Il fatto che per altri valori di ϵ e in generale per altri nuclei, le irregolarità spesso scompaiano, escludono che esse siano dovute alla deconvoluzione attuata sulle densità di carica SOG per ritrovare le densità di probabilità, come era stato ipotizzato in tentativi precedenti.

Si rimanda alla tabella 4.1 per un confronto tra le energie derivate dall'inversione e i dati sperimentali. Sono indicate anche le energie calcolate da [2] per un potenziale di Woods-Saxon.

Non si ha convergenza per $\epsilon = 0.00005 \text{ fm}^{-3}$ o valori minori.

4.1. DENSITÀ PARAMETRIZZATE SOG

Livello	Valori Sperimentali	$\epsilon = 0.0001 fm^{-3}$	$\epsilon = 0.001 fm^{-3}$	Valori WS
Protoni				
1s1/2	-	-30.52	-29.37	-27.14
1p3/2	-18.4	-17.24	-16.11	-14.94
1p1/2	-12.13	-12.09	-10.97	-9.81
Neutroni				
1s1/2	-	-33.02	-32.61	-31.10
1p3/2	-21.84	-19.74	-19.26	-18.62
1p1/2	-15.66	-14.59	-14.11	-13.48

Tabella 4.1: Energie di particella singola in MeV per $l^{16}O$ nei casi sopracitati.

Nucleo: ^{40}Ca

Per il ^{40}Ca sono stati presi in considerazione gli stessi valori di ϵ del nucleo precedente. Un'analisi basata sulle sole energie di singola particella, indica che il procedimento di inversione per i protoni del calcio genera energie più vicine a quelle sperimentali per $\epsilon = 0.0001 fm^{-3}$. Per quanto riguarda invece i neutroni, una minore precisione, corrispondente ad $\epsilon = 0.001 fm^{-3}$, è quella che restituisce le energie più consone con i dati empirici.

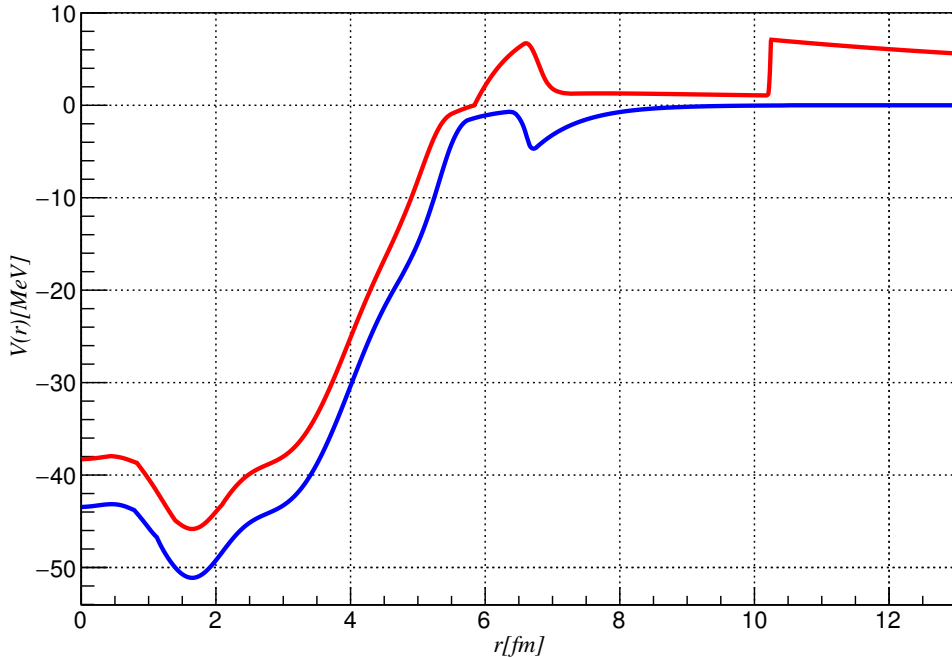


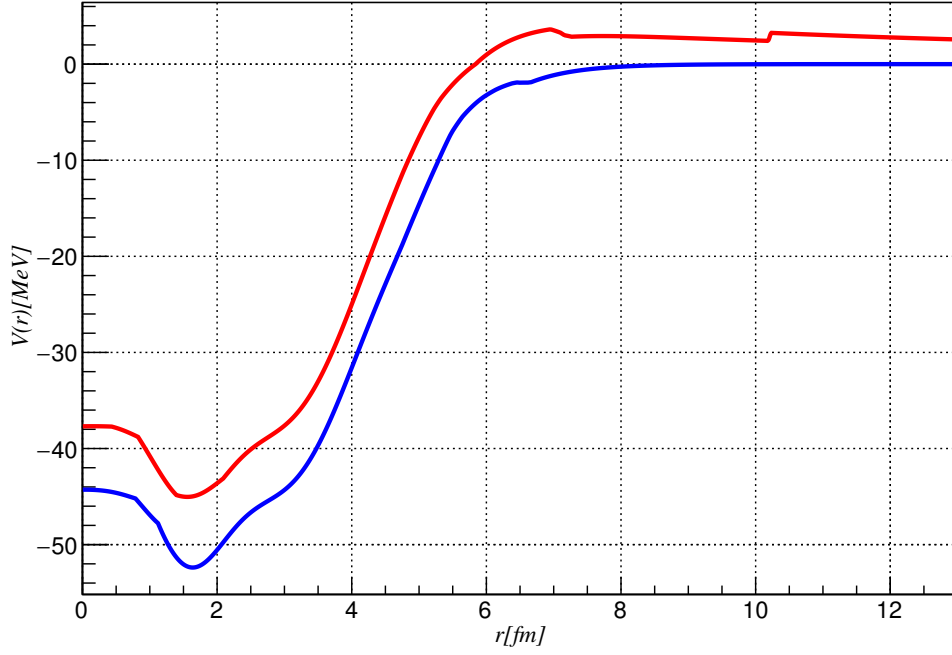
Figura 4.3: Potenziale efficace del ^{40}Ca con SOG ed $\epsilon = 0.0001 fm^{-3}$.

Sono i grafici dei potenziali efficaci però, a mostrare quale sia il valore di ϵ più adatto: richiedere una maggiore precisione nella 3.9, porta ad andamenti irregolari

sulle code, più evidenti proprio nel caso dei protoni che per $\epsilon = 0.0001 fm^{-3}$ presentavano energie migliori.

Poiché l'andamento dei potenziali efficaci nei settori interni del nucleo è pressoché invariato per entrambi i valori di ϵ , è più sensato limitarsi alla richiesta di una precisione minore e cercare di migliorare i valori delle energie successivamente, mediante l'introduzione della massa efficace.

Figura 4.4: Come la figura precedente ma per $\epsilon = 0.001 fm^{-3}$.



Nucleo: ^{208}Pb

Per riuscire ad ottenere dei risultati per questo nucleo è stato necessario attuare la procedura descritta in pagina 21. In particolare si è scelto di dare come *range* energetici di partenza degli intervalli centrati sulle energie corrispondenti alla soluzione dell'equazione di Schroedinger per il potenziale di Woods-Saxon. Infatti, come detto precedentemente, l'implementazione iniziale dell'algoritmo di *Shooting* converge nelle prime iterazioni del procedimento di inversione, ma presenta dei problemi quando potenziali e densità si discostano ulteriormente dai dati di partenza.

Avendo dunque a disposizione delle energie, date dalla risoluzione del problema diretto per il potenziale di Woods-Saxon, è possibile avere energie verosimili di partenza anche per i livelli più interni.

4.2. DENSITÀ PARAMETRIZZATE FERMI (A 3 PARAMETRI)

L'utilizzo di questa nuova implementazione è di grande aiuto nella trattazione del ^{208}Pb , perché oltre a rendere possibile la soddisfazione della condizione di convergenza, essa velocizza notevolmente l'intero procedimento. Per questo motivo si è scelto di adottare lo stesso tipo di implementazione anche per i nuclei più leggeri, ottenendo gli stessi risultati già enunciati ma in tempi molto più brevi.

Il procedimento di inversione per questo nucleo raggiunge la convergenza ancora per un valore di ϵ pari a 0.001fm^{-3} , pari a circa l'1.5% del massimo valore assunto dalla densità (intorno agli 0.06fm^{-3}).

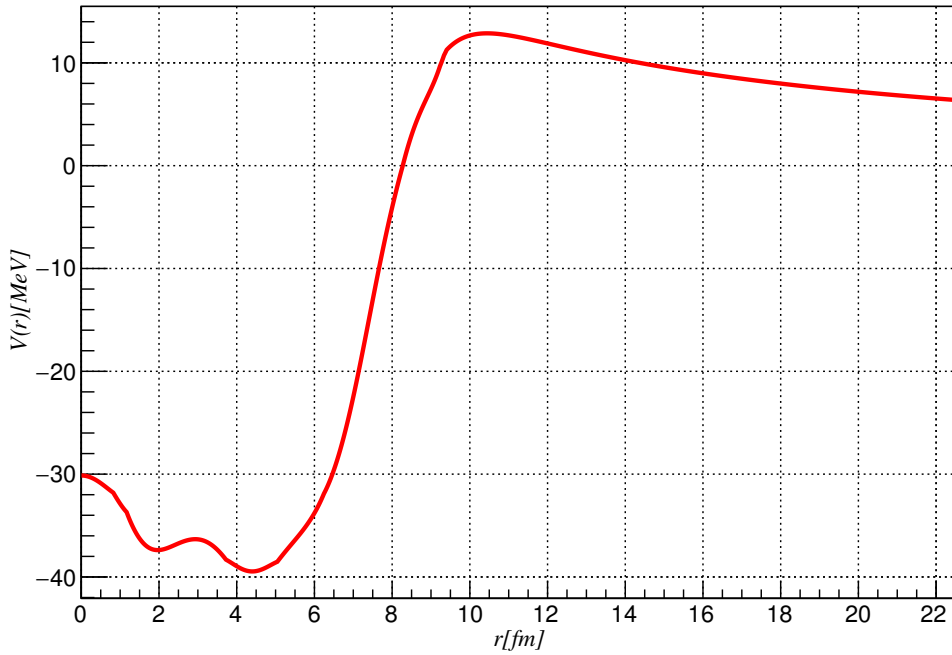


Figura 4.5: Potenziale efficace SOG dei protoni per il ^{208}Pb ed $\epsilon = 0.001$.

4.2 Densità parametrizzate Fermi (a 3 parametri)

A partire dalla precedente parametrizzazione, tramite *fit*, si è ricavata una seconda forma per le densità. In particolare questa è meno precisa in prossimità dell'origine.

Tale imprecisione porta ad una mancata convergenza per l'algoritmo di inversione qualora si voglia fissare il parametro ϵ della condizione 3.9 ad un valore molto piccolo, come fatto precedentemente per le densità SOG.

Nel caso dell' ^{16}O non si ottengono potenziali ragionevoli per valori minori ad $\epsilon = 0.02\text{fm}^{-3}$ (pari al 20% del valore massimo della densità).

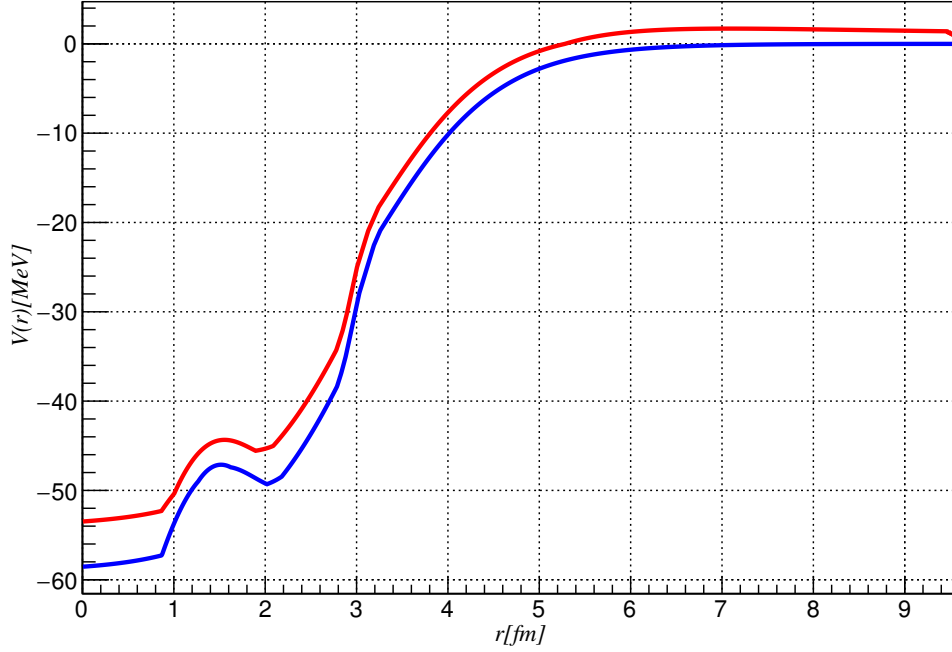


Figura 4.6: Potenziale efficace Fermi per $l^{16}O$ ed $\epsilon = 0.02 fm^{-3}$.

Per il ^{40}Ca invece, $\epsilon = 0.001 fm^{-3}$ produce ancora un buon risultato per il potenziale efficace. Questa differenza è dovuta probabilmente al fatto che $l^{16}O$ è un nucleo più leggero, e quindi le approssimazioni fatte in vicinanza dell'origine hanno un peso maggiore sulle autofunzioni di singola particella e le densità che ne derivano.

Le energie corrispondenti a questo potenziale tuttavia sono un po' lontane rispetto ai valori sperimentali, mentre sono più vicine alle energie associate al potenziale di Woods-Saxon (tabella 4.2).

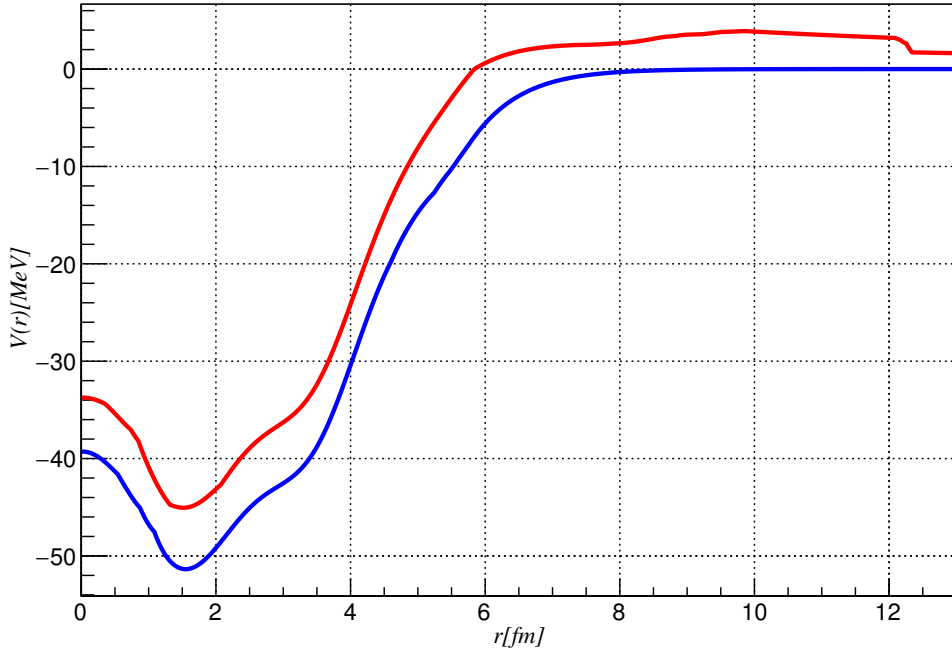
4.3 Densità ottenute da metodi Monte-Carlo

La pagina [22] mette a disposizione i dati per le densità dell' ^{16}O e del ^{40}Ca , ottenuti con metodi Monte Carlo a partire dai due diversi modelli descritti precedentemente.

I dati sono corredati delle loro rispettive barre di errore, più significative in vicinanza dell'origine, nei primi 5 o 6 punti. L'idea principale è stata quella di eseguire l'algoritmo di inversione avendo come densità target, innanzitutto, le densità da metodi Monte Carlo prive di incertezze. Successivamente, onde constatare un'eventuale variazione dei risultati, data dalla presa in considerazione delle barre di errore fornite, si è scelto di aggiungere ai primi cinque dati il loro contributo.

4.3. DENSITÀ OTTENUTE DA METODI MONTE-CARLO

Figura 4.7: *Potenziale efficace Fermi per il ^{40}Ca ed $\epsilon = 0.001$.*



Livello	Valori Sperimentali	$\epsilon = 0.001$	Valori WS
Protoni			
1s1/2	-	-31.10	-30.89
1p3/2	-	-21.82	-21.98
1p1/2	-	-19.24	-19.33
1d5/2	-15.07	-11.95	-12.43
2s1/2	-10.92	-8.14	-8.49
1d3/2	-8.33	-6.64	-7.08
Neutroni			
1s1/2	-	-37.27	-38.84
1p3/2	-	-28.05	-29.54
1p1/2	-	-25.46	-26.95
1d5/2	-22.39	-18.24	-19.61
2s1/2	-18.19	-14.41	-15.68
1d3/2	-15.64	-12.92	-14.31

Tabella 4.2: *Energie in MeV per la densità con parametrizzazione Fermi del ^{40}Ca .*

Perciò, dopo una prima esecuzione sui dati invariati, il procedimento viene avviato una seconda volta su una densità in cui per i primi cinque punti si è sommato al valore originale, quello dato dall'incertezza, tale che intorno all'origine la densità assuma il suo valore massimo. Lo stesso procedimento viene fatto successivamente per una terza esecuzione, stavolta sottraendo ai dati originali i contributi delle incertezze in modo da avere i valori minimi.

Si osserverà in seguito quali siano stati i casi in cui aver tenuto in considerazione le barre di errore per piccoli r abbia portato ad un miglioramento dei risultati dell'inversione, in particolare per le energie di particella singola.

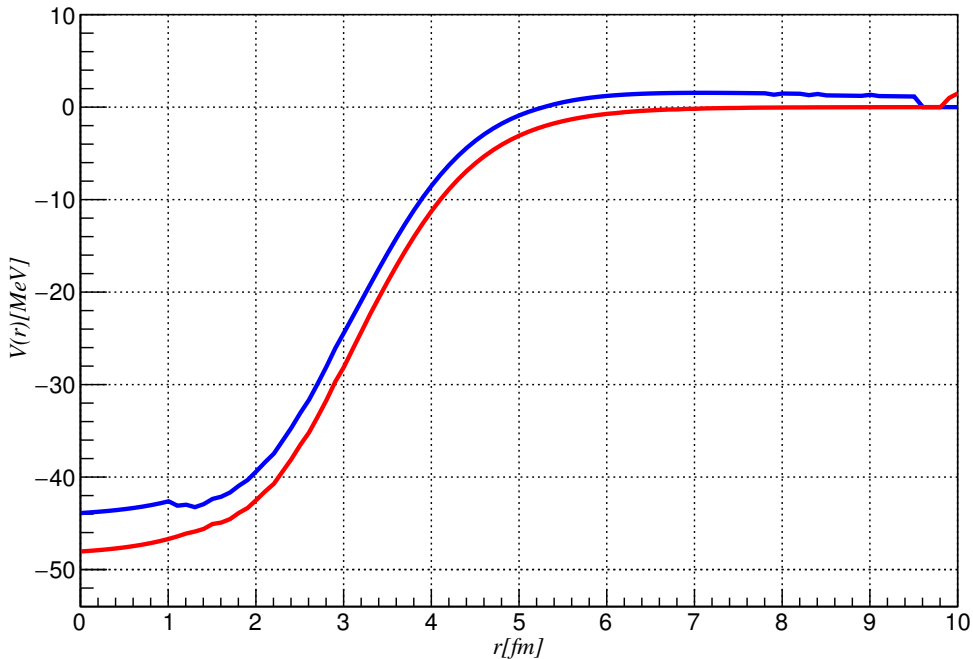
4.3.1 AV18 + UIX

Per questo set di dati la convergenza è possibile a partire da $\epsilon = 0.02 fm^{-3}$, per il quale l'algoritmo si ferma solo un paio di iterazioni. Il risultato dunque non è accurato e non è possibile migliorarlo, in quanto per precisioni maggiori non c'è convergenza, mentre questo valore di ϵ non è in grado di dare risultati soddisfacenti.

Per l'ossigeno l'inversione è possibile sia nel caso di protoni che di neutroni, mentre per il calcio non è possibile ottenere un potenziale efficace per i neutroni che abbia forma accettabile.

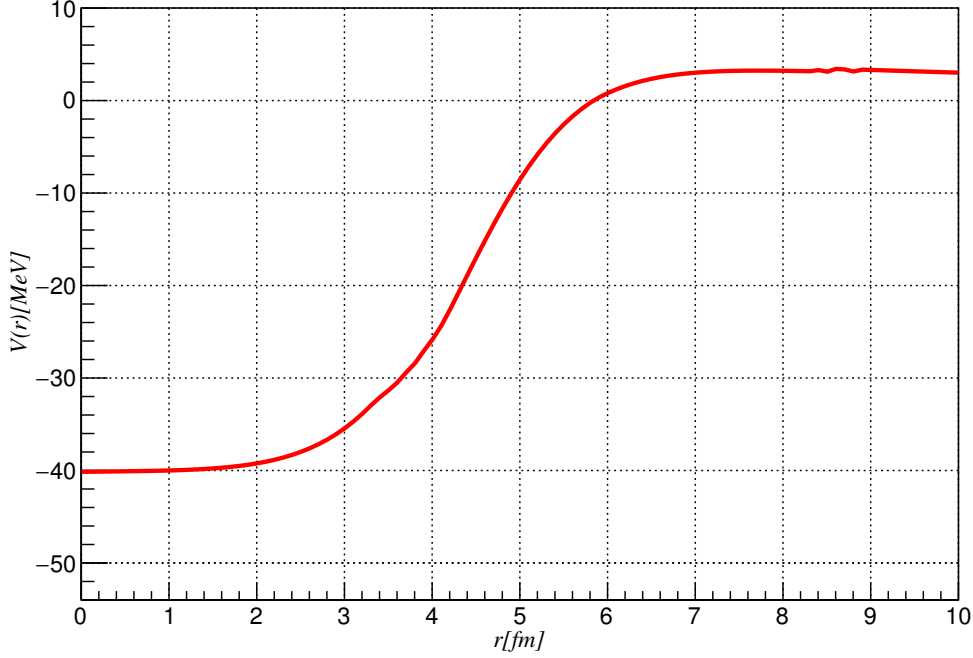
Le energie sono ancora più vicine a quelle relative ad un potenziale di Woods-Saxon che ai dati sperimentali. Inoltre, in questo caso, l'inserimento delle incertezze per i punti vicini all'origine non migliora il risultato.

Figura 4.8: Potenziale efficace per ^{16}O con $\epsilon = 0.02 fm^{-3}$ da densità Monte-Carlo AV18+UIX.



4.3. DENSITÀ OTTENUTE DA METODI MONTE-CARLO

Figura 4.9: *Potenziale efficace per i soli protoni del ^{40}Ca con $\epsilon = 0.02\text{fm}^{-3}$ da densità Monte-Carlo AV18+UIX.*



4.3.2 AV18

Questo set di dati è quello corrispondente al potenziale a soli due corpi.

Nel caso dell' ^{16}O l'algoritmo converge ancora solo a partire da $\epsilon = 0.02\text{fm}^{-3}$ e con solo due iterazioni, come per i dati AV18+UIX. Tuttavia per questa densità, tenere in considerazione il contributo aggiuntivo delle barre di errore porta dei miglioramenti. In particolare qualora si sommino le incertezze ai valori originali dei primi cinque punti (ottenendo quindi la densità massima vicino all'origine), le energie di particella singola risultano più vicine al dato sperimentale che in assenza delle barre di errore, infatti l'algoritmo in questo caso converge anche per $\epsilon = 0.01\text{fm}^{-3}$.

Invece per quanto riguarda i valori minimi, ovvero per i risultati del procedimento di inversione in cui alla densità è stato tolto il contributo dato dall'incertezza, non si osservano miglioramenti rispetto a quelli relativi alla densità inalterata.

Si presentano allora le energie e i potenziali ottenuti soltanto per i dati originali e per la somma di densità e incertezze (i primi due casi):

Figura 4.10: Potenziale efficace per ^{16}O con i dati della densità invariati ed $\epsilon = 0.02\text{fm}^{-3}$. Da densità Monte Carlo AV18.

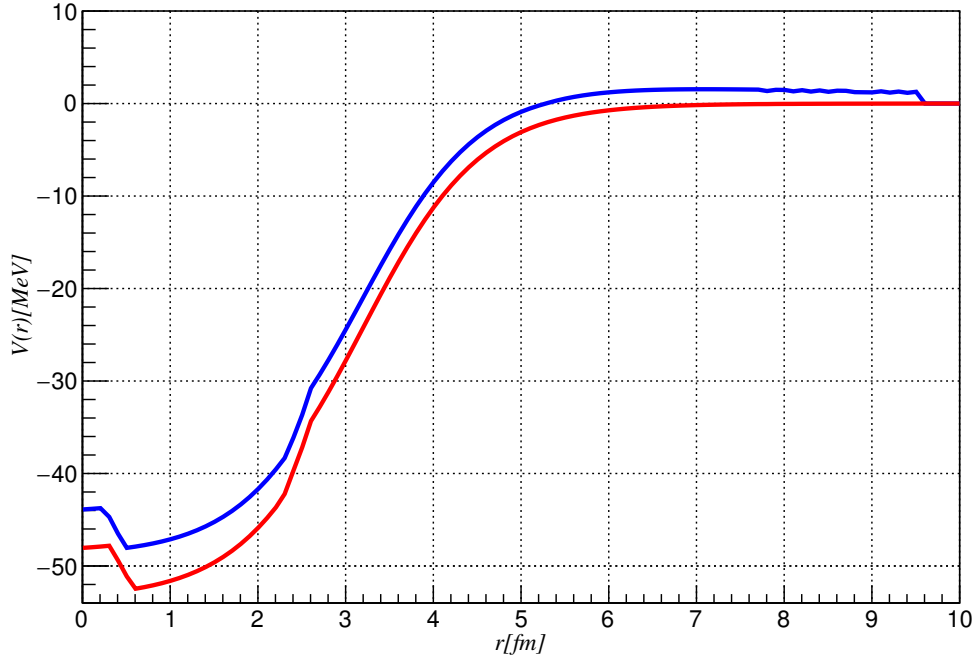
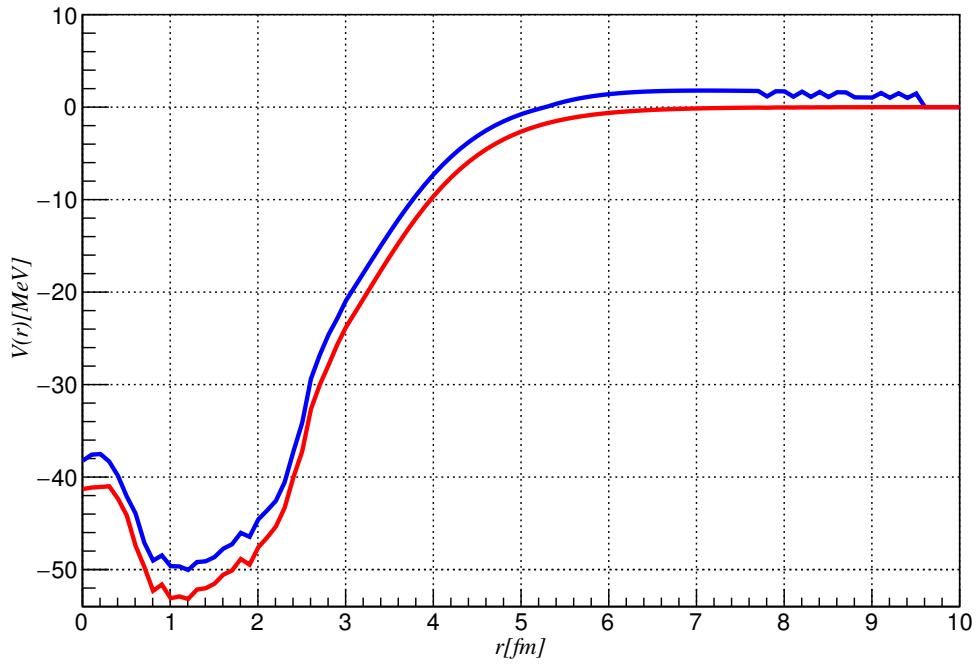


Figura 4.11: Potenziale efficace per ^{16}O per i dati a cui è stata sommata l'incertezza nei primi punti, e per $\epsilon = 0.01\text{fm}^{-3}$. Da densità Monte-Carlo AV18.



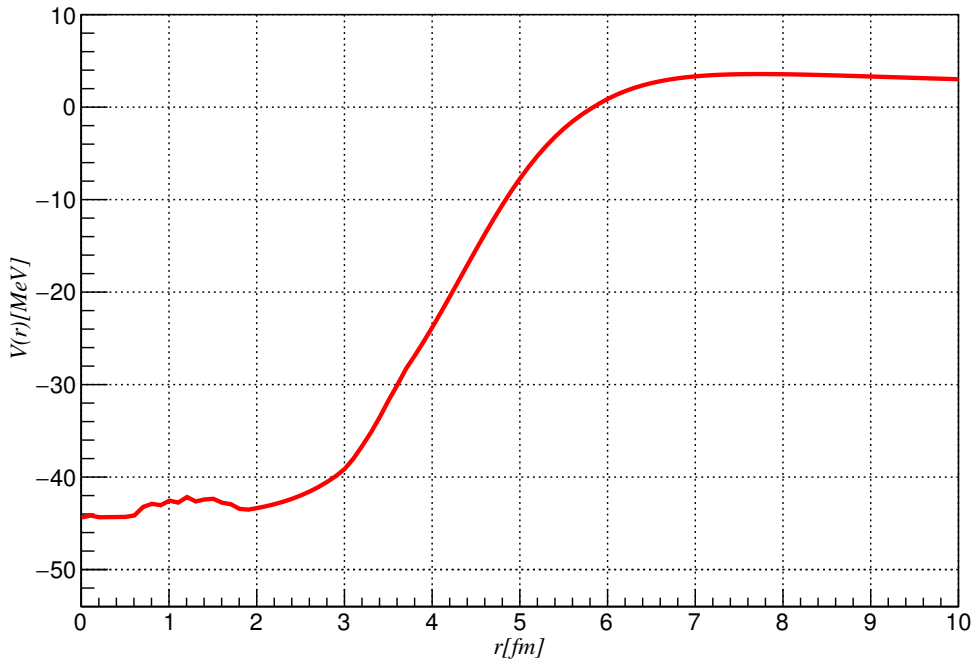
4.3. DENSITÀ OTTENUTE DA METODI MONTE-CARLO

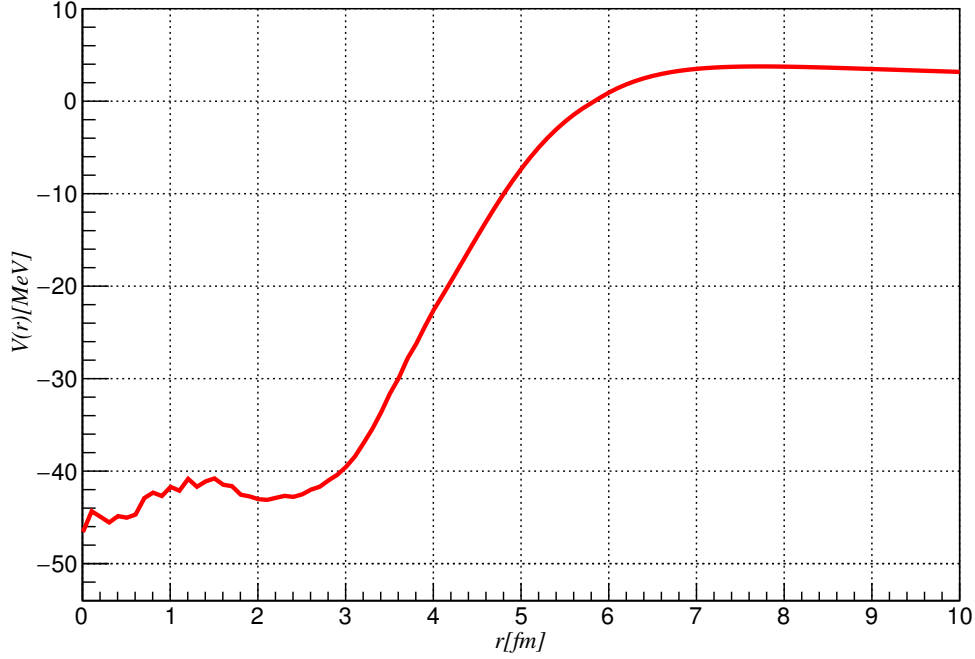
Tabella 4.3: Energie dell' ^{16}O in MeV. L'inversione per il set di dati modificato (densità massima intorno all'origine) avviene per un ϵ pari a 0.01fm^{-3} in 5 iterazioni. Molto probabilmente aumentando il valore di ϵ sarebbe possibile rinvenire delle energie di particella singola ancora più vicine all'esperimento; ma questo andrebbe senz'altro a discapito della forma del potenziale, come successo già in altri casi visti precedentemente.

Livello	Valori Sperimentali	Valori WS	$n(r)$ Originale	$n(r)$ Massima
Protoni				
1s1/2	-	-27.14	-28.84	-30.26
1p3/2	-	-14.94	-16.00	-16.57
1p1/2	-12.13	-9.81	-10.91	-11.51
Neutroni				
1s1/2	-	-31.10	-32.90	-32.21
1p3/2	-21.84	-18.62	-19.72	-19.44
1p1/2	-15.66	-13.48	-14.63	-14.40

Per il ^{40}Ca la convergenza è possibile sia per una precisione del 20% ($\epsilon = 0.02\text{fm}^{-3}$) che del 10% ($\epsilon = 0.01\text{fm}^{-3}$). Tuttavia, le energie più vicine a quelle sperimentali sono quelle corrispondenti ad una precisione minore.

Figura 4.12: Potenziali efficaci per protoni del ^{40}Ca con ϵ 0.02 e 0.01 rispettivamente. Da densità Monte-Carlo AV18.





4.4 Commenti finali

Per i nuclei doppi magici studiati, l'algoritmo di inversione è in grado di generare potenziali efficaci dalle forme attendibili, nonché energie di particella singola corrispondenti, che si avvicinano ai dati sperimentali o ad altri calcoli teorici per potenziali fenomenologici.

Tuttavia, l'accuratezza dei risultati stessi, e quindi la loro prossimità all'esperimento, risulta dipendere strettamente dallo specifico algoritmo di inversione che si è scelto di utilizzare. Questo vincolo è più evidente quando si osservano i valori assunti dalle energie dei livelli al variare del parametro ϵ : Un ϵ più piccolo corrisponde il più delle volte ad energie più vicine ai dati empirici, perché avere una densità di uscita che poco si discosta da quella di partenza consente di migliorare passo dopo passo le posizioni dei livelli.

Il fattore principale a determinare la scelta del valore di ϵ però, è la natura della densità *target* che si sceglie di utilizzare. Cercare di fare calcoli troppo precisi per densità con pochi dati, come quelle provenienti dalle simulazioni Monte Carlo, o provare ad ottenere valori vicini all'esperimento con una densità come quella parametrizzata con una funzione di Fermi, che presenta grandi approssimazioni intorno all'origine, non è possibile, perché l'algoritmo non riesce mai a soddisfare la condizione di convergenza.

4.4. COMMENTI FINALI

In generale si osserva che per le densità provenienti da una maggiore quantità di dati (SOG) l'algoritmo converge con ottimi risultati per una precisione dell'1% circa. In tutti gli altri casi la convergenza viene raggiunta, per lo più, richiedendo una precisione non inferiore al 10 – 20%.

Capitolo 5

Risultati: Massa Efficace

L'inserimento di una massa efficace m^* all'interno dell'algoritmo di inversione dovrebbe essere in grado di migliorare i risultati per quanto riguarda i livelli energetici, generando degli autovalori più concordi ai dati sperimentali.

5.1 Energie di particella singola

Il modo più appropriato, da un punto di vista formale, di inserire m^* nell'equazione di Schroedinger, sarebbe quello di rendere esplicito il gradiente della funzione $1/m^*(r)$ attraverso la sua dipendenza dalla densità. Tuttavia, come detto nella sezione 2.3.2 svolgere questa operazione implica la conoscenza di una forma per l'andamento di $m^*(r)$ non nota a priori.

Nella ricerca di una strada alternativa, si può procedere per gradi ed inserire la dipendenza da m^* in modo intuitivo, ad esempio sostituendo il suo valore a quello della massa m , innanzitutto come costante e poi in funzione del livello. Dall'osservazione dei risultati ottenuti, quali le profondità dei potenziali efficaci e le posizioni relative dei livelli rispetto ai dati sperimentali per diversi valori di m^* , si possono trarre delle indicazioni sul successo di questo metodo di sostituzione. Ad ogni modo sarà comunque necessario, successivamente, considerare l'azione di m^* in modo più rigorosamente fondato.

Alla fine di ottenere risultati più precisi, si è scelto di effettuare l'inversione per le sole densità sperimentali parametrizzate *SOG*.

5.1.1 Sostituzione diretta

Il primo tentativo di correzione consiste nell'inserire direttamente nell'equazione di Schroedinger la massa efficace, sostituendo m^* ad m .

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_r^2 + \frac{l(l+1)\hbar}{2mr^2} + v_{ext}(r) \right] u(r) = Eu(r) \quad (5.1)$$

Il problema principale che si incontra al momento dell'esecuzione dell'algoritmo, è che per i nuclei di ^{40}Ca e ^{208}Pb non si ha convergenza per determinati valori di m^* . In particolare ^{40}Ca non converge per $m^* = 0.6m$ e $0.7m$, mentre il Pb per $m^* = 0.6m$, $0.7m$ e $0.8m$.

Nelle pagine successive si presentano i grafici per i potenziali efficaci con i corrispondenti livelli di particella singola, ottenuti con questo approccio nei casi convergenti. Oltre ai casi di mancata convergenza segnalati nella precedentemente, altre casistiche non riportate riguardano valori di m^*/m che, nonostante la convergenza, generano livelli energetici notevolmente distanti dalle misure sperimentali attese, al punto da non essere comparabili.

I livelli rappresentati con una linea tratteggiata indicano le energie ottenute con l'algoritmo di inversione, mentre i dati sperimentali sono indicati con una linea continua. Poi, per un facile confronto, ogni livello è segnalato con un colore diverso.

In generale si osserva che con il metodo di sostituzione, al diminuire del rapporto m^*/m le buche dei potenziali sono più profonde, mentre per quanto riguarda i livelli, al variare della massa efficace essi non assumono posizioni regolari dalle quali si possa desumere un andamento in funzione di m^* . In particolare, non si ottengono valori di m^* per i quali le energie derivate dall'inversione abbiano valori più affini a quelli sperimentali, rispetto alle energie ottenute con lo stesso procedimento ma senza l'inclusione della massa efficace.

5.1. ENERGIE DI PARTICELLA SINGOLA

Figura 5.1: *Neutroni dell' ^{16}O con $\frac{m^*}{m}$ pari a 0.6, 0.7 e 0.8, nell'ordine.*

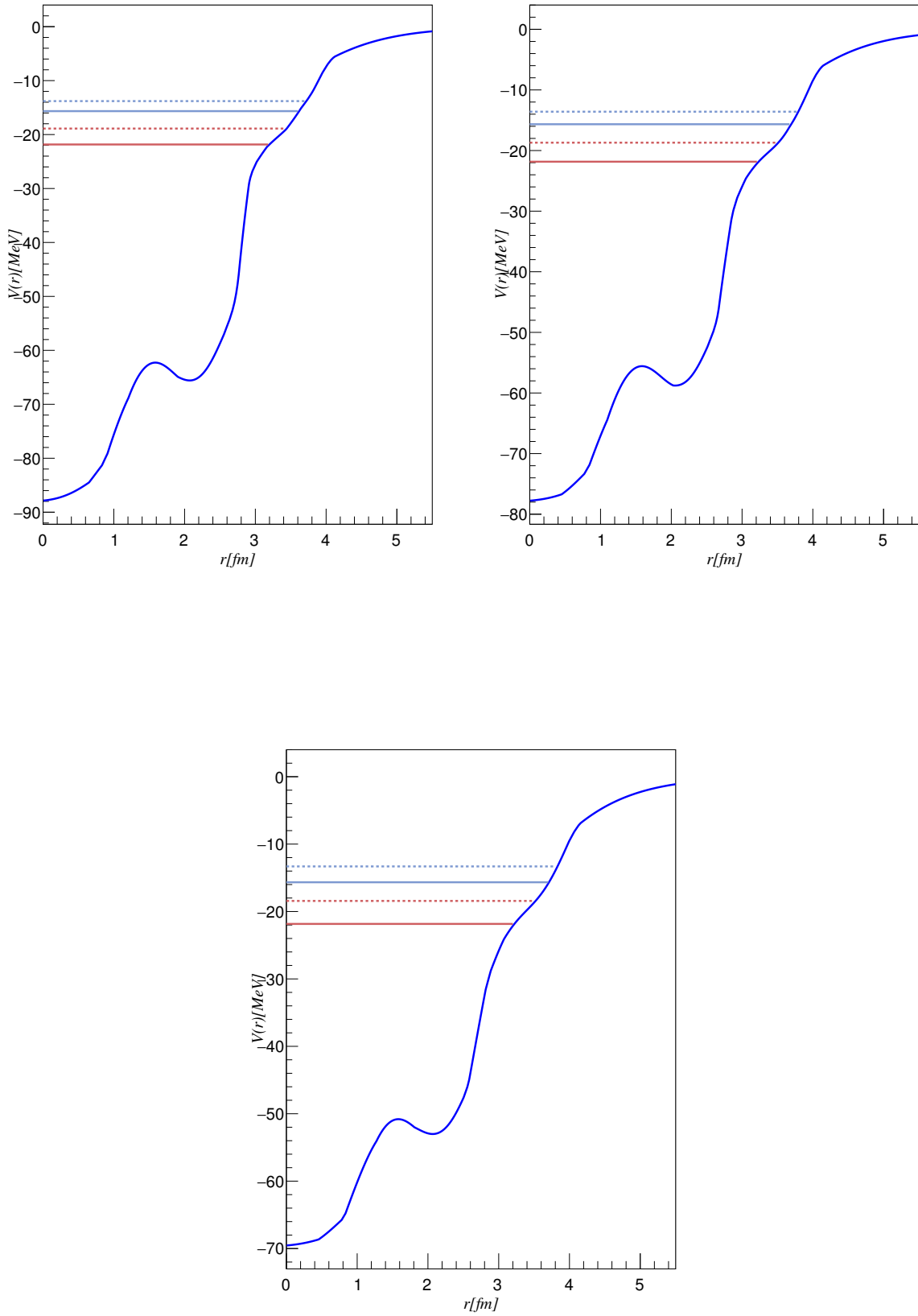
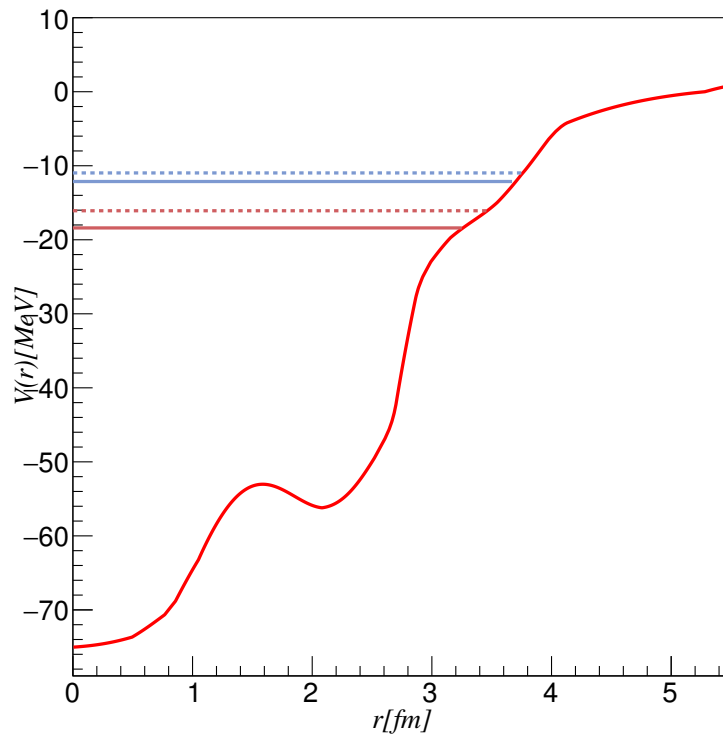
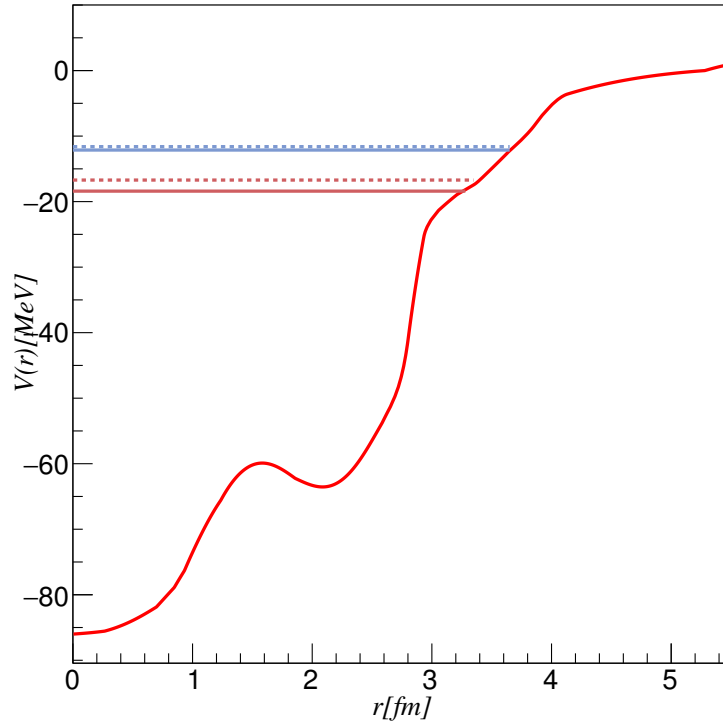


Figura 5.2: *Protoni dell' ^{16}O con $\frac{m^*}{m}$ pari a 0.6, 0.7 e 0.8.*

5.1. ENERGIE DI PARTICELLA SINGOLA

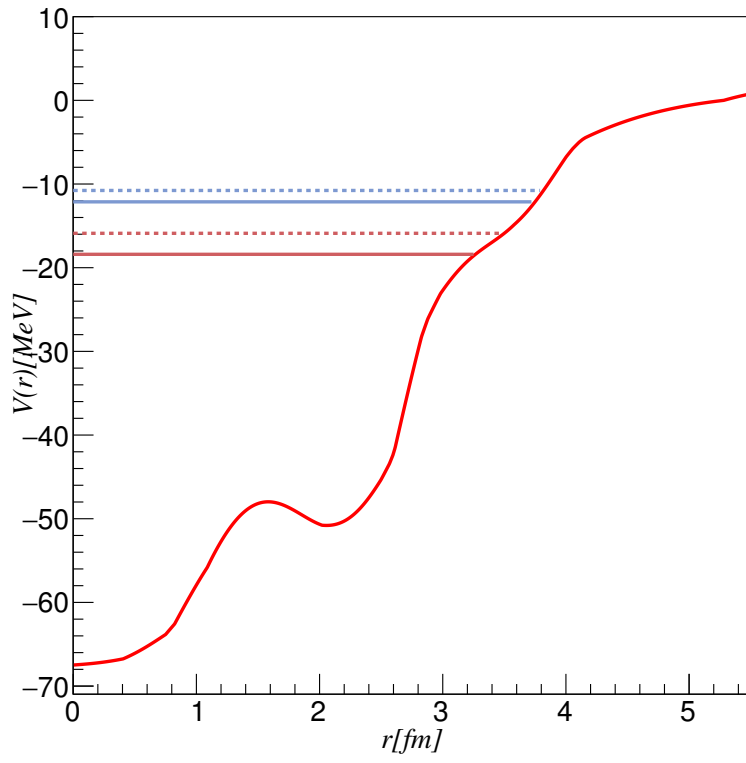


Figura 5.3: *Neutroni dell' ^{40}Ca con $\frac{m^*}{m}$ pari a 0,8 e 0.9.*

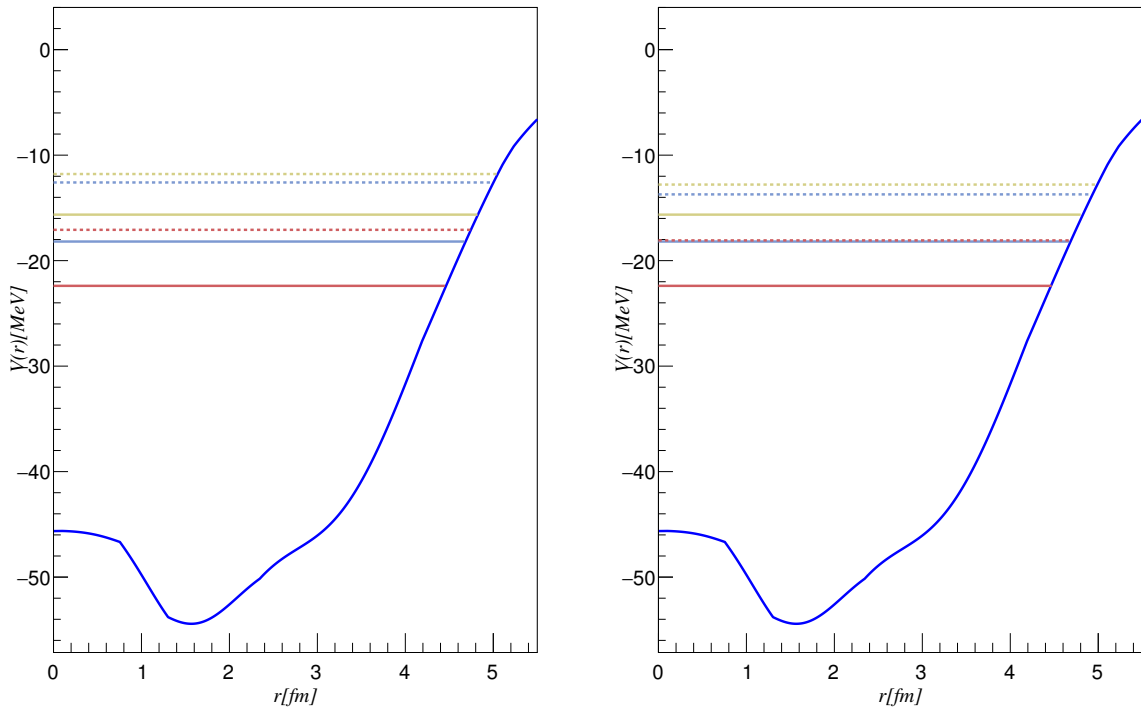
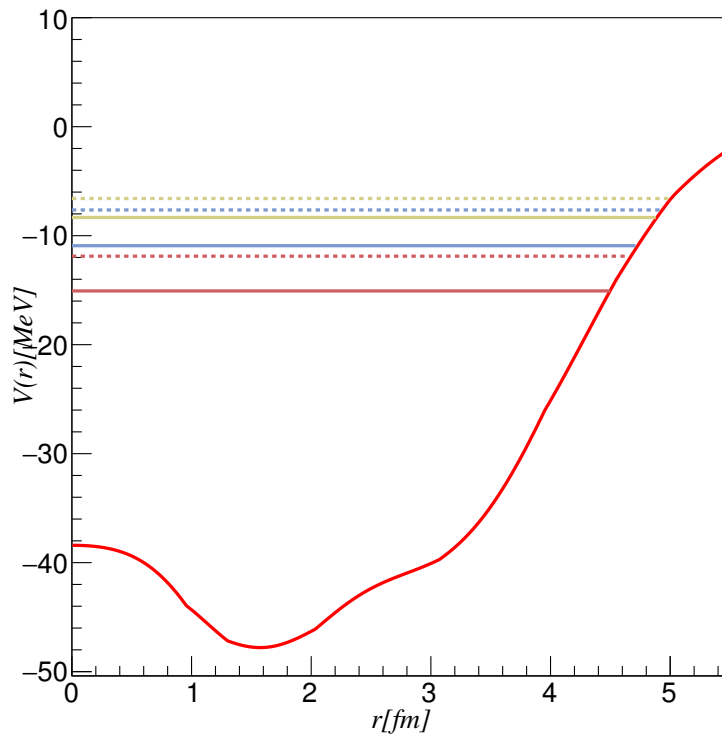
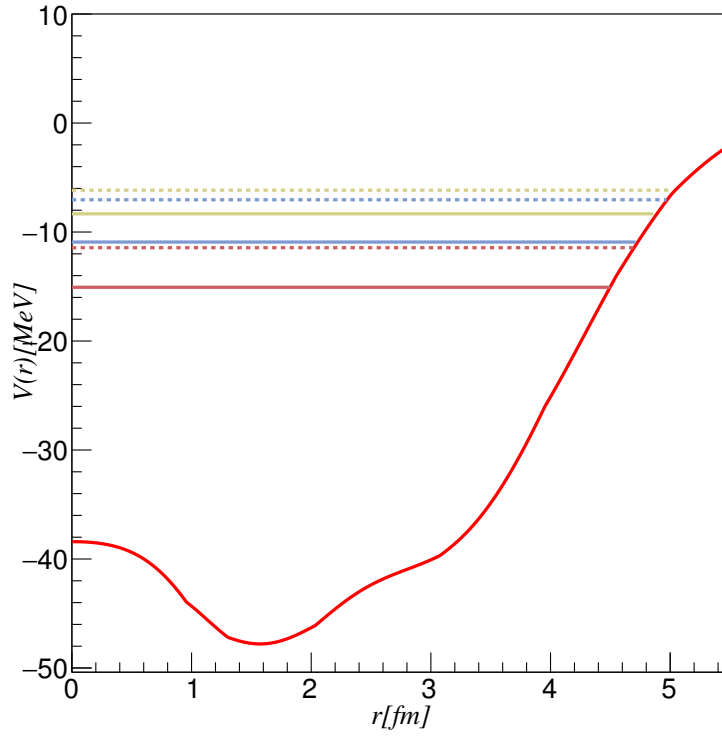
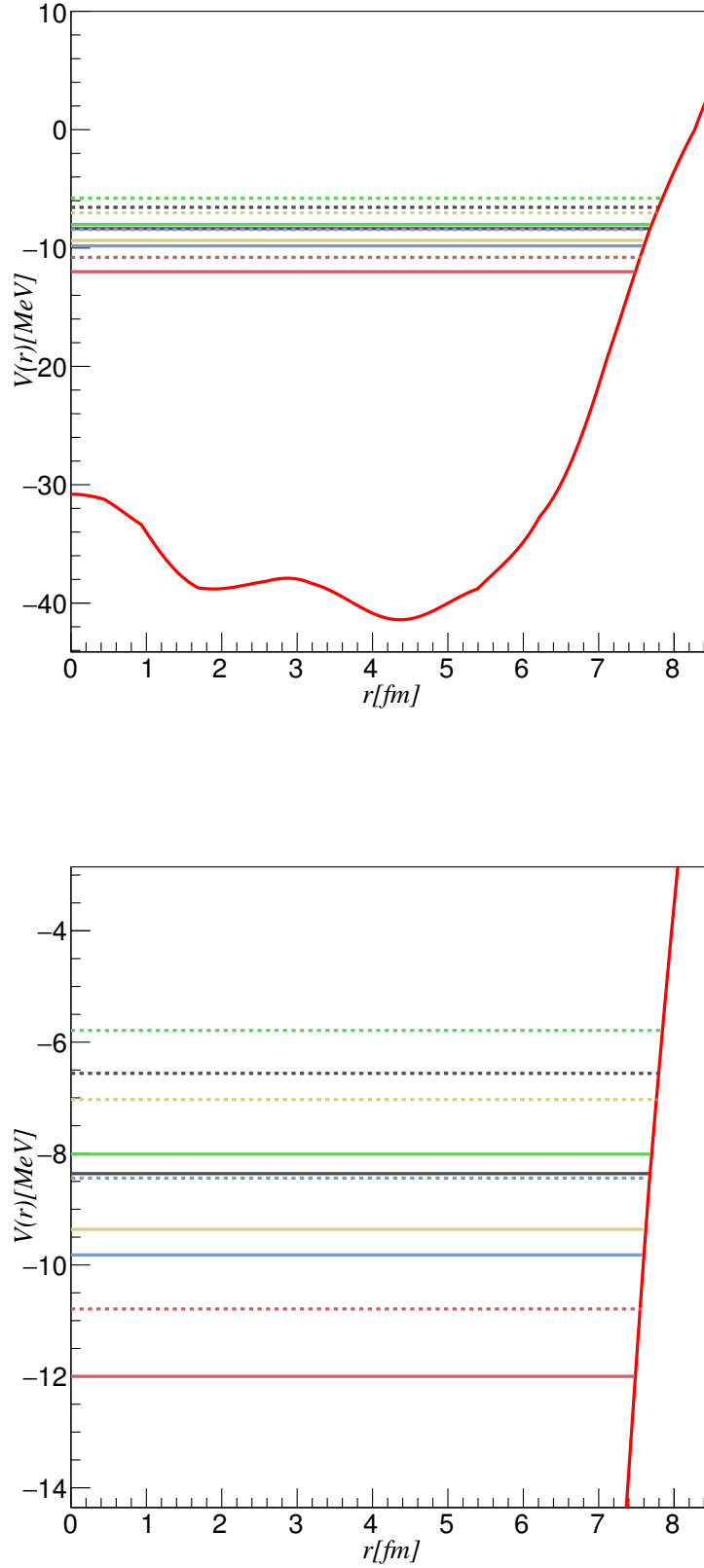


Figura 5.4: *Protoni dell' ^{40}Ca con $\frac{m^*}{m}$ pari a 0,8 e 0.9, come nel caso dei neutroni.*



5.1. ENERGIE DI PARTICELLA SINGOLA

Figura 5.5: Solo caso utile per il ^{208}Pb con $m^* = 0.9m$. Sotto, una rappresentazione ingrandita dei livelli.



5.1.2 Metodo Perturbativo

I risultati ottenuti con il primo approccio suggeriscono che la dipendenza dell'equazione di Schroedinger dalla massa efficace abbia forma diversa da quella di una semplice sostituzione nel termine cinetico.

Seguendo l'approccio descritto alla fine del paragrafo 2.3.2 e in particolare dall'equazione 2.51 si è scelto di inserire m^* secondo un metodo perturbativo. Ciò che si vuole ottenere dall'applicazione dell'algoritmo di inversione con questa nuova correzione, è di trovare il valore migliore per la massa efficace di *ogni livello* che possa riprodurre il più fedelmente i dati sperimentali.

Si può procedere alla verifica in due modi: La dipendenza da m^* dell'equazione 2.51 è cambiata rispetto alla 5.1, perciò un primo passo può essere quello di inserire per tutti i livelli lo stesso valore di massa efficace, e di osservare come e se, i valori cambiano rispetto all'approccio di sola sostituzione usato prima.

In un secondo momento si può procedere ad inserire per ogni livello una m^* diversa, eseguendo l'algoritmo per tutte le possibili combinazioni¹ e trovare fra tutte quella che genera le migliori energie.

Sorgono alcune domande.

- **Entrambi i modi saranno in grado di dare gli stessi risultati?**

L'algoritmo di inversione si avvale della densità, che a sua volta viene generata dalle autofunzioni che risolvono l'equazione di Schroedinger per il potenziale esterno, e che sono tra loro indipendenti.

Nel caso in cui ad esempio, per due diversi livelli di un nucleo, il rapporto $\frac{m^*}{m}$ migliore sia distinto per le due *shell*, dovrebbe essere possibile ricavare questo risultato sia dall'inserimento di una stessa m^* per tutti i livelli (in due esecuzioni successive del programma), sia nel caso in cui siano inseriti entrambi i rapporti migliori in una singola esecuzione.

- **Cosa succede per i livelli di cui non è noto un dato sperimentale?**

Come per l'appunto precedente, variare o meno la massa degli altri livelli dovrebbe essere indifferente agli effetti della generazione dell'energia del livello preso in considerazione. Specialmente, nel caso in cui l'algoritmo venga eseguito per tutte le combinazioni possibili di $\frac{m^*}{m}$ si dovrebbe trovare che le migliori combinazioni sono tutte quelle che contengono gli stessi valori dei rapporti $\frac{m^*}{m}$ per i livelli di cui è disponibile una misura.

¹Cioè, per tutti i valori che assume $\frac{m^*}{m}$ nell'insieme $\{0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0\}$, assegnandoli all'equazione di Schroedinger di ogni livello del nucleo.

5.1. ENERGIE DI PARTICELLA SINGOLA

Unica m^* per tutti i livelli

Come descritto nel precedente paragrafo, il primo passo consiste nella verifica dei risultati quando la massa efficace assume lo stesso valore per tutti i livelli.

Innanzitutto, i nuovi risultati sono diversi da quelli che si ottenevano usando lo stesso rapporto nel caso di semplice sostituzione. In più, mostrano un andamento regolare al variare di m^* , a conferma del fatto che un riscaldamento del potenziale esterno in funzione della massa efficace, oltre alla semplice sostituzione nel termine cinetico (2.51), era necessario per includere tutti i contributi importanti derivati dall'introduzione di m^* .

Gli esiti sono riportati in seguito sotto forma di grafici che rendono facilmente comparabili i valori delle energie fornite da ogni diverso valore di m^* tra di loro e col dato sperimentale.

Inoltre, per quantificare i risultati ottenuti nel caso in cui si dovesse scegliere un unico valore di m^* , costante per tutti i livelli, si è pensato di calcolare gli scarti quadratici medi dei risultati rispetto ai valori sperimentali.

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (E_i - E_{exp})^2}{N}} \quad (5.2)$$

I valori migliori per ogni nucleo sono evidenziati in ogni tabella per protoni e neutroni.

I grafici sono organizzati in modo che ogni colonna corrisponda alle energie generate dall'algoritmo per i livelli più esterni e per un certo valore del rapporto $\frac{m^*}{m}$, indicato esplicitamente nella riga in basso. La prima colonna da sinistra contiene invece i valori sperimentali.

Figura 5.6: Energie rinvenute per i livelli dell' ^{16}O nel caso di neutroni (blu), e protoni (rosso). In questo caso specifico le migliori energie si hanno per un valore comune di m^* per tutti i livelli considerati, pari a $0.9m$.

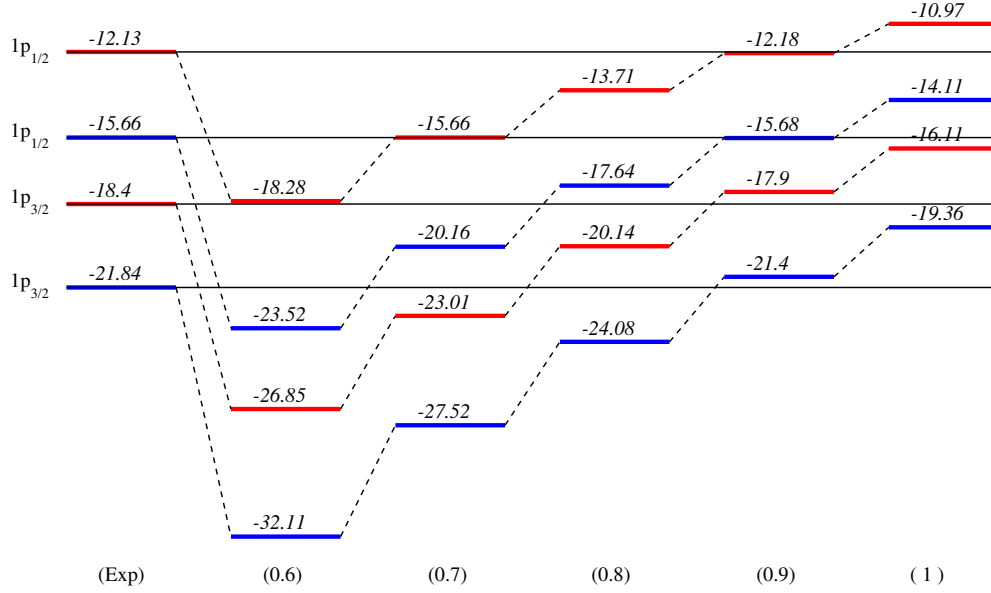
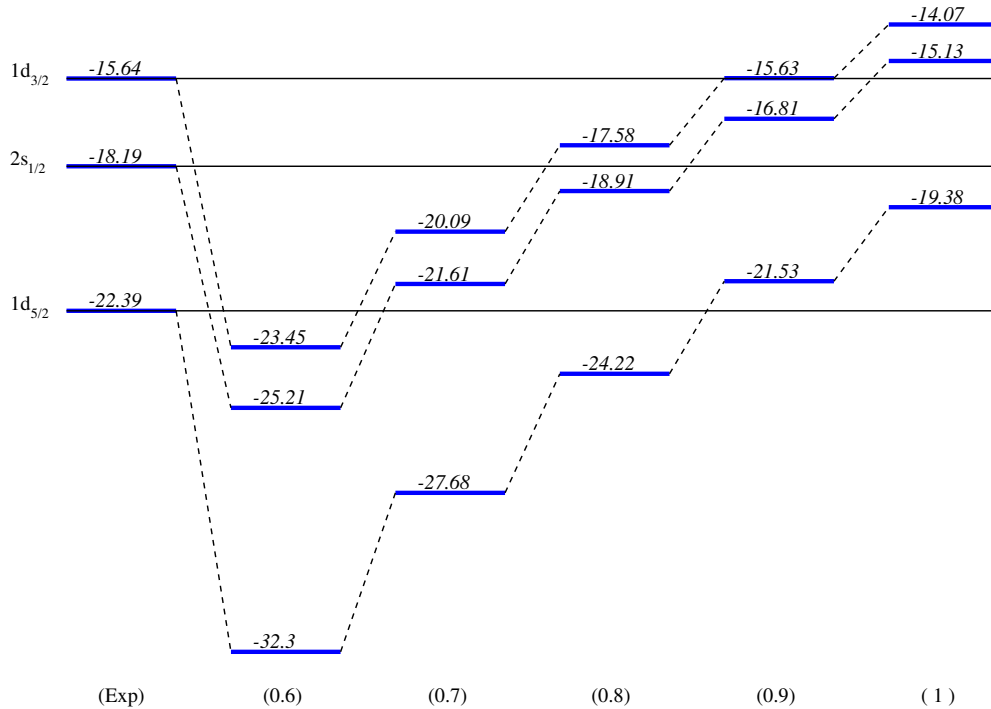


Figura 5.7: Livelli per i neutroni del ^{40}Ca . Le migliori energie si hanno per $m^* = 0.8m$ per il livello $(2s_{1/2})$ ed $m^* = 0.9m$ per i livelli $(1d_{5/2})$ e $(1d_{3/2})$.



5.1. ENERGIE DI PARTICELLA SINGOLA

Figura 5.8: Livelli per i protoni del ^{40}Ca .

Le migliori energie si hanno ancora per $m^* = 0.8m$ per i livelli ($2s_{1/2}$) e ($1d_{5/2}$), ed $m^* = 0.9m$ per il livello ($1d_{3/2}$).

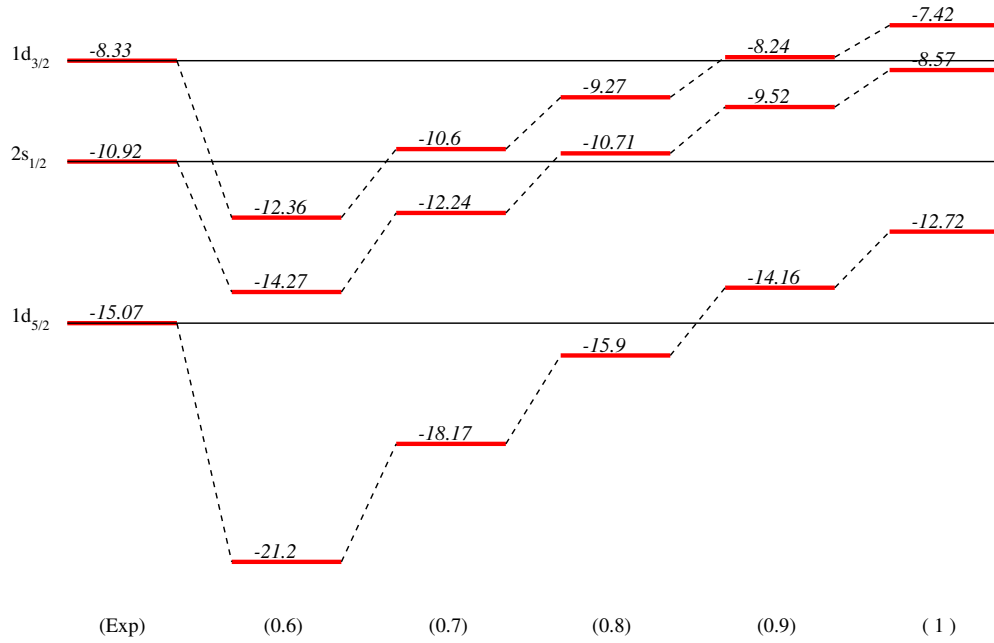


Figura 5.9: Energie per i protoni del ^{208}Pb . Le migliori energie si hanno per $m^* = 0.9m$ oppure per massa invariata a seconda del livello.

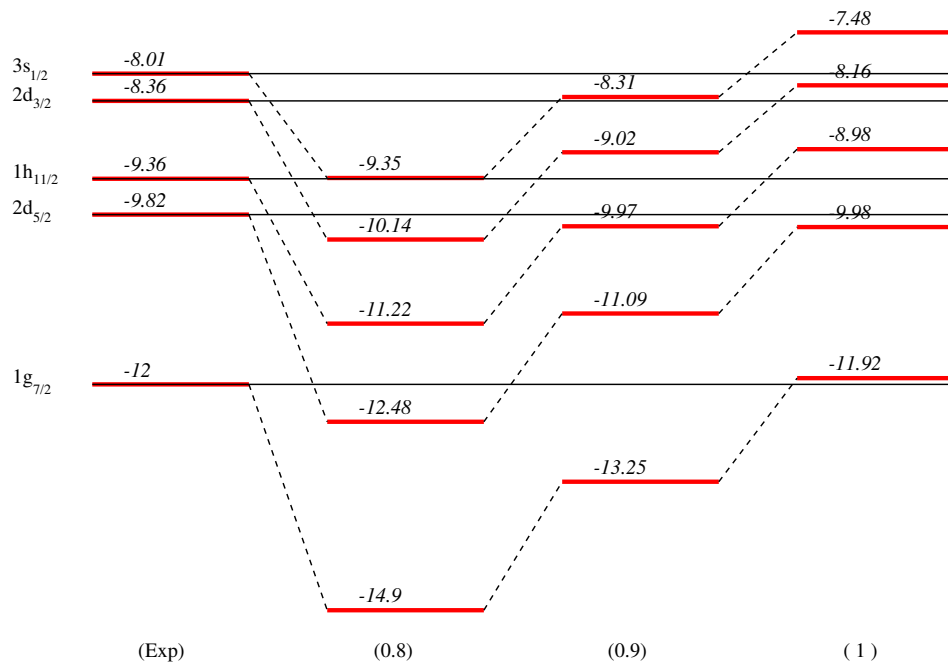


Tabella 5.1: *Scarto quadratico medio per $l^{16}O$ e il ^{40}Ca*

	^{16}O		^{40}Ca	
m^*/m	Protoni	Neutroni	Protoni	Neutroni
0.6	7.39	9.14	4.66	8.34
0.7	4.11	5.12	2.34	4.45
0.8	1.66	2.11	0.73	1.59
0.9	0.36	0.44	0.97	0.94
1.0	1.82	2.07	1.99	2.64

Tabella 5.2: *Scarto quadratico medio per il ^{208}Pb*

m^*/m	Protoni
0.8	2.19
0.9	0.90
1.0	0.32

Il caso particolare del piombo suggerisce che l'aggiunta del termine di massa efficace possa essere più influente per *shell* più interne nel caso di nuclei pesanti, mentre per i livelli esterni il valore della massa senza correzioni fornisce già energie accettabili e molto vicine a quelle sperimentali.

Esecuzione di tutte le combinazioni

La seconda verifica vuole che per ogni esecuzione del programma, ogni livello abbia un valore di massa efficace inserito *ad hoc*, e che per ogni esecuzione i valori delle masse efficaci siano diverse da quelle precedenti, fino ad esaurire tutte le possibili combinazioni. Da un punto di vista computazionale, questo tentativo potrebbe essere un po' tedioso. Se si prende come esempio l' ^{16}O , il totale di combinazioni possibili per 5 diversi valori di $\frac{m^*}{m}$ da assegnare a 3 livelli è pari a 125. Questo significa eseguire l'algoritmo di inversione, di per sé lento e impegnativo, ben 125 volte solo per il nucleo più leggero.

Per evitare di affrontare subito questo test si decide di eseguire una volta sola l'algoritmo, nel caso del ^{40}Ca , che sia per protoni che neutroni ha una m^* ideale diversa per ogni livello (o almeno per due). Il test viene eseguito assegnando ad $\frac{m^*}{m}$ il valore 0.8 per le *shell* $1d_{\frac{5}{2}}$ e $2s_{\frac{1}{2}}$, e 0.9 per la $1d_{\frac{3}{2}}$ nel caso dei protoni. Per i neutroni invece i valori sono 0.9, 0.8 e 0.9. Gli altri livelli tengono la loro massa invariata.

In entrambi i casi i risultati confermano che l'energia del livello, corrispondente a un certo valore del rapporto tra le masse, è indipendente dalle masse dei nucleoni degli altri livelli. I valori ritrovati per le energie sono gli stessi che erano stati trovati nel test a masse uguali per tutti i livelli.

5.2. ENERGIA TOTALE

Infine il test per tutte le combinazioni viene eseguito per i protoni dell'ossigeno. Le motivazioni di questa scelta sono due: il costo computazionale dell'algoritmo per questo nucleo è minore, ed è più semplice lavorare con un nucleo di cui sono note la maggior parte delle energie sperimentali (due su tre). Con nuclei più pesanti, per non rendere l'algoritmo troppo complicato bisognerebbe fissare le masse dei livelli senza riscontro sperimentale al loro valore invariato, venendo meno allo scopo di questa ultima verifica, che vuole variare le masse efficaci di tutti i livelli.

Come detto precedentemente, l'algoritmo viene eseguito per 125 diverse combinazioni di $\frac{m^*}{m}$ per i tre livelli. Si riscontra che le triadi che generano valori più vicini ai valori sperimentali sono:

- (0.6) (0.9) (0.9)
- (0.7) (0.9) (0.9)
- (0.8) (0.9) (0.9)
- (0.9) (0.9) (0.9)
- (1.0) (0.9) (0.9)

Cioè, come volevasi dimostrare, rimane valido il risultato ottenuto con il primo metodo, in cui le energie migliori per le *shell* $1p_{\frac{3}{2}}$ e $1p_{\frac{1}{2}}$ sono date da $\frac{m^*}{m} = 0.9$. Se fosse noto anche il valore sperimentale per il livello più profondo si potrebbe determinare quale di queste combinazioni è quella più vicina al caso fisico.

5.2 Energia Totale

È possibile verificare la coerenza intrinseca dell'algoritmo facendo un confronto tra le energie totali teoriche che si ricavano dalle seguenti due espressioni:

$$E_{TOT} = \sum_j t_{jj} + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) \quad (5.3)$$

e

$$E_{TOT} = \frac{1}{2} \sum_j (t_{jj} + \epsilon_j) \quad (5.4)$$

con

$$t_{jj} = \int d\mathbf{r} \psi_j^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_j. \quad (5.5)$$

Nella 5.3 $U(\mathbf{r})$ è il campo medio generato dal procedimento di inversione e $\rho(\mathbf{r})$ è la relativa densità, mentre nella 5.4 gli ϵ_j sono gli autovalori di particella singola derivati sempre dall'algoritmo.

Da un controllo a massa invariata ($m^*/m = 1$) si riscontra che nell' ^{16}O i valori assunti dalle energie totali teoriche nei due casi soprastanti sono gli stessi a meno di una differenza dell'1% (e pari a -25.52 MeV e -25.53 MeV rispettivamente), dunque il procedimento funziona in modo coerente. Tuttavia, l'energia totale teorica non coincide con il valore noto dall'esperimento (-127.62 MeV) ma risulta di modulo minore rispetto a quella attesa.

Il motivo più probabile per l'ottenimento di questo risultato è che non si sia tenuto conto tutti i termini che reggono l'interazione, quali i termini dipendenti dalle derivate della densità, nonché dell'energia totale Coulombiana e di spin-orbita. Quale verifica di questa ipotesi sono state calcolate le energie totali anche nella considerazione dell'introduzione di una massa efficace, quindi per $m^*/m < 1$ e in particolare per i valori che meglio riproducono le energie dei singoli livelli.

Si è visto che l'energia prodotta tramite la 5.3 è la stessa che veniva calcolata nel caso di massa invariata ², invece la 5.4 produce un'energia più grande in modulo (che viene circa raddoppiato) ma ancora non abbastanza vicino al valore atteso. Se ne deduce che il modo in cui è stata inserita la massa efficace all'interno dell'equazione di Schroedinger non è ancora completo e non tiene conto di tutti gli effetti più importanti. Non è sbagliato però ipotizzare che tenere considerazione di ulteriori termini relativi alla densità, così come quelli che sono funzione delle derivate successive della densità, potrebbe avvicinare il valore teorico dell'energia a quello sperimentale.

² Infatti l'inserimento della massa efficace con il metodo perturbativo non modifica il potenziale efficace, ma solo le autoenergie, e dunque il secondo integrale nella 5.3 non cambia valore rispetto al caso precedente

Capitolo 6

Conclusioni

L'obiettivo di questo lavoro era quello di verificare l'applicabilità della Teoria del Funzionale Densità nella sua formulazione inversa ai sistemi nucleari, in particolare per i nuclei doppi magici, tenendo conto dell'effetto prodotto dall'inserimento di un termine dipendente dal gradiente della densità.

L'aggiunta di questo ulteriore termine è stata necessaria al fine di ricavare risultati più vicini ai dati sperimentali, specialmente per quanto riguarda le energie di singola particella. Ciò che si è trovato infatti è che l'aggiunta di un termine dipendente dal gradiente della densità nel funzionale densità, ovvero l'introduzione della massa efficace del nucleone nell'equazione di Schroedinger, anche se trattata semplicemente in termini perturbativi, porta a notevoli miglioramenti delle energie senza intaccare i potenziali efficaci ricavati.

Nello specifico, si è trovato che l'applicazione della formulazione inversa delle equazioni di Kohn-Sham fornisce i migliori risultati per le energie di particella singola dei livelli più esterni (dei quali è noto un dato sperimentale) qualora il rapporto tra massa efficace e massa nuda assuma un valore compreso tra 0.8 e 0.9 per i nuclei leggeri come ^{16}O e ^{40}Ca e tra 0.9 e 1.0 per il ^{208}Pb . Tuttavia, questa trattazione risulta incompleta in quanto l'energia totale derivata dal procedimento di inversione è troppo piccola in modulo rispetto al valore sperimentale atteso.

Si può concludere dicendo che l'inclusione del gradiente della densità, quale ulteriore *input* in questo problema, ha un ruolo importante, e consente di approfondire questa teoria di carattere generale, avvicinando sempre più l'approssimazione teorica ai dati forniti dall'esperimento. Resta comunque da osservare che risultati migliori si potrebbero avere qualora si fosse in grado di conoscere in maniera indipendente la dipendenza esplicita della massa efficace dalla coordinata radiale, e che l'inclusione di termini dipendenti da derivate successive della densità potrebbe rendere un'energia totale teorica più affine a quella sperimentale.

Bibliografia

- [1] <http://physics.nist.gov/constants>.
- [2] J. Suhonen, *From Nucleons to Nucleus*, Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [3] M. Bender, P.H. Heenen and P.G. Reinhard, *Self-consistent mean-field models for nuclear structure*, Rev. Mod. Phys. 75, 2003, pp. 121-180.
- [4] N.Schwierz, I. Wiedenhöver and A. Volya, Parameterization of the Woods-Saxon Potential for Shell-Model Calculations, 2017.
- [5] Woods, Roger D. and Saxon, David S., *Diffuse Surface Optical Model for Nucleon-Nuclei Scattering*, American Physical Society, Phys.Rev. 95.2, 1954, pp. 577-578.
- [6] F. Salvat, A. Jablonski and C.J. Powell, *Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules*, Computer Physics Communications, 165 (2005), pp. 157-190.
- [7] P. Hohenberg and W. Kohn, *Inhomogeneous electron gas*, Physical Review, 136 (1964), pp. B864-B871.
- [8] W. Kohn and L.J. Sham, *Self-consistent equations including exchange and correlation effects*, Physical Review, 140 (1965), pp. A1133-A1138.
- [9] D. Vautherin and D. M. Brink, *Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. I. Spherical Nuclei* Physical Review C, 5 (1972), pp. 626-647.
- [10] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, World Scientific Pub Co Inc, 1997.
- [11] V. F. Weisskopf, *The Problem of an Effective Mass in Nuclear Matter* Nuclear Physics 3, 1957.
- [12] J. P. Blaizot and B. L. Friman, *On the Nucleon Effective Mass in Nuclear Matter*, Nuclear Physics A372, 1981, pp. 69-89.

BIBLIOGRAFIA

- [13] B. Behera *et al*, *Momentum and density dependence of the mean field in nuclear matter*, Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, 1998.
- [14] D. Davesne, J. Navarro, J. Meyer, K. Bennaceur, and A. Pastore, *Two-body contributions to the effective mass in nuclear effective interactions* arXiv:1712.03003v2 [nucl-th], 2017.
- [15] D. J. Jones, *Use of a shooting method to compute eigenvalues of fourth-order two-point boundary value problems*, Journal of Computational and Applied Mathematics 47, 1993.
- [16] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77*, Cambridge University Press, 1992.
- [17] R. van Leeuwen, E. J. Barends, *Exchange-correlation potential with correct asymptotic behavior*, Physical Review A 49 4, 1994.
- [18] D. S. Jensen and A. Wasserman, *Numerical Methods for the Inverse Problem of Density Functional Theory*, International Journal of Quantum Chemistry, 2017.
- [19] H. de Vries, C. W. de Jager, and C. de Vries, *Nuclear Charge-Density Distribution Parameters from Elastic Electron Scattering*, Atomic Data and Nuclear Data Tables 36, 1987, pp. 495-536.
- [20] R. Anni, G. Cò and P. Pellegrino, *Nuclear Charge Density Distributions from Elastic Electron Scattering Data*, Nuclear Physics A 584, 1995, pp. 35-59.
- [21] R. Pohl, A. Antognini, F. Nez, F. D. Amaro, F. Biraben, J. M. R. Cardoso, D. S. Covita, A. Dax, S. Dhawan, L. M. P. Fernandes, A. Giesen, T. Graf, T. W. Hänsch, P. Indelicato, L. Julien, C.-Y. Kao, P. Knowles, E.-O. L. Bigot, Y.-W. Liu, J. A. M. Lopes, L. Ludhova, C. M. B. Monteiro, F. Mulhauser, T. Nebel, P. Rabinowitz, J. M. F. dos Santos, L. A. Schaller, K. Schuhmann, C. Schwob, D. Taqqu, J. F. C. A. Veloso, and F. Kottmann, *The size of the proton*, Nature 466, 2010, pp. 213–216.
- [22] phy.anl.gov/theory/research/density/.
- [23] C. B. Dover, N. van Giai, *The Nucleon-Nucleus Potential in the Hartree-Fock Approximation with Skyrme's Interaction*, Nuclear Physics A 190, 1972, pp. 373-400.

- [24] Steven C. Pieper, *Quantum Monte Carlo Calculations of Light Nuclei*, Nuclear Physics A-751, 2005, pp. 516-532.
- [25] N.F. Mott and H.S.W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, 1949.
- [26] A. F. Fantina, J. Margueron, P. Donati and P. M. Pizzochero, *Nuclear energy functional with a surface-peaked effective mass: Global properties*, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 38 025101, 2011.
- [27] Takayuki Miyagi, Takashi Abe, Ryoji Okamoto, Takaharu Otsuka, *Ground-state energies and charge radii of ^4He , ^{16}O , ^{40}Ca , and ^{56}Ni in the unitary-model-operator approach*, Progress of Theoretical and Experimental Physics, Volume 2015, Issue 4, 2015.