



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO
FACOLTÀ DI SCIENZE E TECNOLOGIE
CORSO DI LAUREA TRIENNALE IN FISICA

Potenziali nucleari dall'inversione delle equazioni di Kohn-Sham con metodi iterativi

Relatore:

Prof. Gianluca Colò

Correlatore:

Prof. Xavier Roca-Maza

Candidato:

Pietro Benzoni

Matricola: **906726**

Anno Accademico 2019/2020

Indice

1	Stato dell'arte	2
1.1	Modello a shell	2
1.2	Teorie di campo medio autoconsistenti	4
1.3	Density Functional Theory	6
1.4	Calcoli <i>ab initio</i>	6
1.5	Motivazione del lavoro	7
2	Premesse teoriche	9
2.1	Teoremi di Hohenberg e Kohn	9
2.2	Equazioni di Kohn-Sham	11
2.3	Metodo IKS	13
2.3.1	Metodo vLB	13
3	Struttura del codice numerico	16
3.1	Problema diretto: dal potenziale alla densità.	17
3.1.1	Algoritmo di shooting	17
3.1.2	Potenziale coulombiano	18
4	Risultati	19
4.1	Problema inverso: dalla densità al potenziale.	19
4.2	Diffusion Monte Carlo - AV4'	20
4.2.1	Fit delle densità	22
4.2.2	Dalle densità ai potenziali: grafici	24
4.3	Self Consistent Green Functions - NNLOsat	28
4.3.1	Dalle densità ai potenziali: grafici	28
4.4	Calcolo dell'energia	35
4.4.1	Autovalori degli orbitali di Kohn-Sham	35
4.4.2	Energia di separazione	36
4.4.3	Energia totale	37
4.5	Confronto con il metodo CV	38
5	Conclusioni	41
A	Derivate funzionali	43
	Bibliografia	47

Capitolo 1

Stato dell'arte

L'obiettivo di questo capitolo è di presentare brevemente, senza la pretesa di essere esaustivi sull'argomento, alcuni metodi nell'ambito dello studio della struttura nucleare che sono fondamentali non solo per porre le basi tecniche ma anche per dare motivazione ai metodi e agli scopi che sono oggetto del presente lavoro di tesi.

Poiché lo studio dei fenomeni nucleari è un campo molto ampio e complesso non si ha a disposizione un modello standard dal quale tutte le proprietà d'interesse possono essere derivate. Di conseguenza è utile restringersi allo studio di modelli che riguardano una ristretta categoria di fenomeni; in particolare vogliamo ora approfondire i metodi più generali che si occupano di proprietà di *bulk* quali densità, raggio di carica, energia di legame, energia di separazione.

1.1 Modello a shell

Dallo studio dei livelli energetici dei nuclei emergono delle regolarità nel comportamento di alcune grandezze come il raggio nucleare o l'energia di separazione al variare del numero dei suoi costituenti. La forte somiglianza con il comportamento degli elettroni atomici ha suggerito un trattamento analogo a quello che viene chiamato a *modello a shell* anche per i nucleoni.

Questo può essere realizzato a diversi livelli di approssimazione. Il più semplice è quello di particelle non interagenti. L'idea è che ciascun nucleone si muova di un moto indipendente dalla presenza degli altri nucleoni, sotto l'azione di un potenziale centrale efficace che riassume la media delle interazioni con tutti gli altri. Va inoltre specificato che, sebbene stiamo parlando di particelle indipendenti, non sono totalmente escluse correlazioni tra di esse a causa della richiesta di antisimmetria globale della funzione d'onda per un sistema di fermioni.

Tale potenziale è analogo al potenziale centrale esercitato dal nucleo nei confronti degli elettroni in un atomo, con la differenza che non è fisicamente identificabile un centro di attrazione. Il sistema è quindi descrivibile in termini di un hamiltoniana del tipo

$$H_0 = \sum_{i=1}^A [T(r_i) + U(r_i)] \quad (1.1.1)$$

dove T è l'energia cinetica dell' i -esima particella e U il potenziale centrale efficace di singola particella.

La verifica di tale rappresentazione del modello nucleare è avvenuta tramite la ricerca di un corretto potenziale efficace che determinasse correttamente i livelli energetici ottenuti sperimentalmente. In particolare era necessario riuscire a riprodurre i cosiddetti *numeri magici*, cioè valori del numero atomico Z , di neutroni N o di massa A in corrispondenza dei quali i nuclei ad essi corrispondenti risultavano particolarmente stabili. Un passo determinante per la scelta di un buon potenziale che determinasse il giusto comportamento dei livelli energetici è stato la formulazione del potenziale empirico di Woods-Saxon [WS54]

$$U(r) = \frac{U_0}{1 + \exp\frac{r-R_N}{a}} \quad (1.1.2)$$

come potenziale centrale efficace più realistico possibile per la descrizione del campo medio nucleare. Alla caratteristica forma della buca è associata l'idea di un'interazione a breve range, descritta dal decadimento esponenziale entro un raggio finito, a differenza del comportamento di un'interazione a lungo range come quella coulombiana. Possiamo quindi vedere che la forma del potenziale rispecchia qualitativamente il profilo della densità, avvicinandosi significativamente a zero oltre il raggio sperimentale del nucleo R_N e mostrando una transizione continua a livello della superficie che rappresenti la decrescita dell'interazione nel passaggio dall'interno all'esterno del nucleo, con una rapidità regolata dal parametro a . Il valore del raggio R_N è determinato dalla relazione empirica $R_N = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ con $r_0 \approx 1.2$ fm e $a \approx 0.67$ fm. La profondità della buca U_0 invece assume valori tipici attorno ai -50 MeV [SWV07] e può essere formulata nel modo seguente in modo da tener conto della simmetria del nucleo:

$$U_0 = 51 \pm 33 \frac{N - Z}{N + Z} \text{ MeV} \quad (1.1.3)$$

dove il segno $\pm$ è associato rispettivamente al caso di protoni e neutroni. L'equazione (1.1.3) permette di riprodurre fenomenologicamente la maggiore intensità del legame p-n rispetto ai legami n-n e p-p.

Il potenziale di Woods-Saxon deve essere poi completato aggiungendo un contributo di spin-orbita all'interazione, rompendo così la simmetria sferica nelle coordinate di posizione, ma permettendo di osservare la regolarità attesa dei numeri magici nei livelli energetici nucleari, vedi **Figura 1.1**, validando così le ipotesi fatte. In particolare tale contributo ha la forma $H_{SO} \propto \frac{1}{r} \frac{dU}{dr}$, verificato anche a livello empirico fissando una certa costante moltiplicativa. In particolare, come riportato in [BM98], si è osservato che i dati ottenuti tramite esperimenti di scattering possono essere fittati da un potenziale della forma

$$V_{ls}(r) = V_{ls}(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) r_o^2 \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \quad (1.1.4)$$

con $V_{ls} \approx 17$ MeV ed r_o già definito sopra nel potenziale di Woods-Saxon.

Va quindi sottolineato che questo risultato ha validità solo entro la possibilità di rappresentare il nucleo come un sistema di nucleoni non interagenti in un campo medio. A livello sperimentale la struttura a numeri magici non risulta essere universale, ma si rivela invece variabile allontanandosi dalla valle di stabilità. In tali casi è evidente che il modello a shell non interagente vada superato: storicamente si è iniziato a studiare il potenziale di campo medio nucleare generato nel contesto dei modelli autoconsistenti.

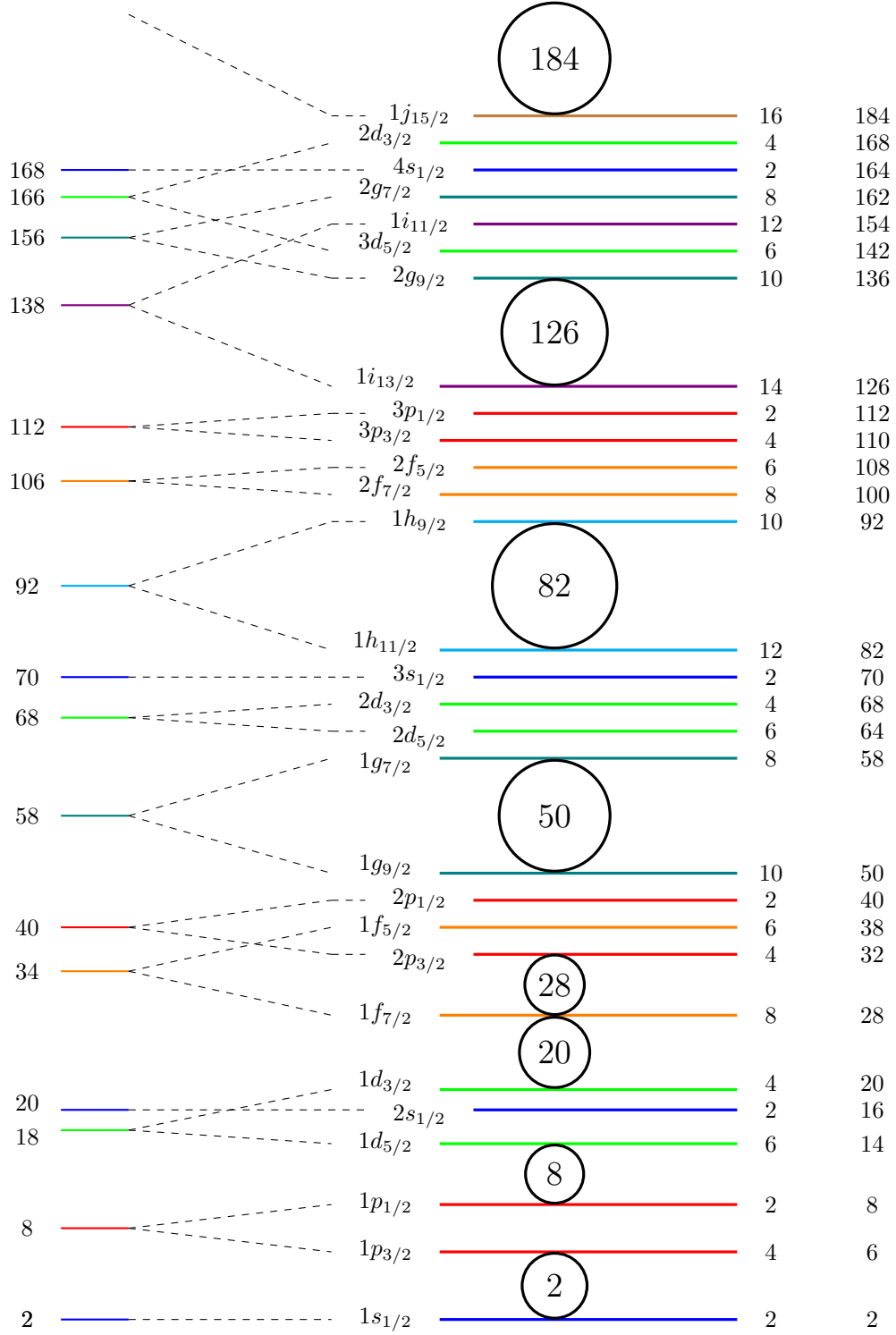


Figura 1.1: Rappresentazione dei livelli energetici del modello nucleare a shell. Figura presa da [Sca18]

1.2 Teorie di campo medio autoconsistenti

Come visto nella sezione precedente, in un sistema a molti corpi una teoria di campo medio consente di studiare le particelle del sistema come se fossero non interagenti all'interno di un potenziale efficace. A differenza del modello a shell, il quale utilizza

un semplice potenziale fissato, una teoria autoconsistente determina il campo medio in maniera iterativa attraverso le equazioni di Hartree-Fock.

Nell'ambito della fisica nucleare [Col20] i modelli di campo medio autoconsistenti vennero inizialmente introdotti con l'idea di poter trovare un potenziale efficace V_{eff} adatto a descrivere l'energia del ground-state calcolata come il minimo del valore di aspettazione dell'hamiltoniana

$$E = \langle \Psi | T + V_{eff} | \Psi \rangle \quad (1.2.1)$$

con $|\Psi\rangle$ generale determinante di Slater di autofunzioni di singola particella, consistente con le simmetrie del sistema.

Per predire le corrette proprietà nucleari diventò necessario l'utilizzo di potenziali efficaci dipendenti dalla densità del sistema. Il motivo è che le interazioni tra le particelle nel nucleo sono altamente correlate, per cui non è sufficiente inserire termini di interazione a due corpi, e la soluzione diventa quella di esplicitare direttamente la dipendenza dell'interazione dalla densità stessa del sistema, [BHR03]. L'idea quindi è quella di costruire un potenziale fenomenologico utilizzando una somma di termini che caratterizzino le proprietà necessarie per rendere più realistica l'interazione efficace.

Un'importante classe di interazioni efficaci è quella formulata da Skyrme come modello per l'interazione nucleare e interpretata da Brink e Vautherin in [VB72] come potenziale efficace parametrizzato direttamente sulle osservabili dei nuclei. Tale potenziale è costituito da un numero variabile di termini, attorno ai 10, che definiscono le proprietà di un'interazione a zero range (di contatto), fortemente dipendente da spin, isospin, momento relativo tra i nucleoni e con un contributo di spin-orbita. Assume la forma tipica

$$\begin{aligned} V_{\text{Skyrme}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \frac{1}{2} t_1(1 + x_1 P_\sigma) (\mathbf{k}^{\dagger 2} \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_2) + \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k}^2) \\ & + t_2(1 + x_2 P_\sigma) \mathbf{k}^\dagger \cdot \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k} + \frac{1}{6} t_3(1 + x_3 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \\ & + i W_0 (\sigma_1 + \sigma_2) \cdot \mathbf{k}^\dagger \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k} \end{aligned} \quad (1.2.2)$$

dove $P_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \sigma_1 \cdot \sigma_2)$ è il termine di scambio di spin, $\mathbf{k} = -\frac{i}{2}(\nabla_1 - \nabla_2)$ è l'operatore di momento relativo e i 10 parametri liberi sono x_i, t_i con $i = 0, \dots, 3$, α e W_0 .

Un'altra interazione efficace molto utilizzata è quella di Gogny

$$\begin{aligned} V_{\text{Gogny}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & \sum_{j=1}^2 e^{-\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2}{\mu_j^2}} (W_j + B_j P_\sigma - H_j P_\tau - M_j P_\sigma P_\tau) \\ & + t_3(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) + i W_{ls} (\sigma_1 + \sigma_2) \cdot \mathbf{k}^\dagger \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k} \end{aligned} \quad (1.2.3)$$

costituita dalla somma di due gaussiane con un termine di scambio, un termine dipendente dalla densità e un termine di spin-orbita.

L'utilizzo di hamiltoniane efficaci $H[\rho]$ dipendenti dalla densità porta alla formulazione dell'energia come funzionale della densità (*Energy Density Functional*, EDF) attraverso il valore di aspettazione

$$E[\rho] = \langle \Psi | H[\rho] | \Psi \rangle \quad (1.2.4)$$

e permettendo lo spostamento dallo studio del potenziale efficace $V[\rho]$ all'interesse diretto nelle formulazioni possibili delle EDF.

Quest'ultimo passaggio è ciò che porta i metodi di campo medio nucleari ad avvicinarsi molto alla logica della teoria del funzionale densità, la quale verrà presentata nella prossima sezione.

1.3 Density Functional Theory

La formulazione della *Density Functional Theory* (DFT) [PY89] ha portato un'importante innovazione nello studio dei sistemi a molti corpi. La sua origine è fortemente legata al fondamentale lavoro di Hohenberg e Kohn (1964) [HK64], che verrà ripreso nella Sez. 2, il quale mostra la possibilità di sostituire ad una complicata funzione d'onda $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ e alla relativa equazione di Schrödinger, la semplice densità $\rho(\mathbf{r})$ e lo schema di calcolo associato da cui essa viene dedotta.

Nell'ambito dei sistemi nucleari la DFT prende inizialmente forma come metodo di campo medio autoconsistente [Col18], come mostrato nella Sez. 1.2, con la possibilità di descrivere l'EDF come in (1.2.4) come valore di aspettazione di un'hamiltoniana efficace dipendente dalla densità.

Il successivo passaggio concettuale, come anticipato, è stato quello di abbandonare la necessità di determinare le EDF come valore di aspettazione di un'hamiltoniana definita da un sottostante potenziale $V[\rho]$ e di lavorare direttamente sulla selezione dei termini che possono apparire nel funzionale energia. L'applicazione di tale modifica ha mostrato un miglioramento nella riproduzione delle corrette proprietà nucleari [Kor+10].

La ricerca del perfezionamento delle EDF nucleari ha portato allo studio dei termini che possono contribuirvi, i quali sono stati classificati in [Per+04]. Il problema diventa infatti tecnicamente difficile nel momento in cui è necessario fittare EDF molto generali, con il conseguente numero elevato di termini.

In questa direzione diventa allora interessante la possibilità di rimanere nell'ambito ben consolidato della DFT e cercare di separarsi da un approccio fenomenologico, il quale mostra difficoltà nel proporsi come metodo universale nella determinazione delle EDF. Una modalità per realizzare tale proposito è data dall'implementazione all'interno del formalismo della DFT di risultati ottenuti da calcoli *ab initio*, introdotti nella sezione successiva.

1.4 Calcoli *ab initio*

Il termine *ab initio*, con il quale viene coperto uno spettro molto ampio di modelli, è utilizzato per riferirsi a metodi a molti corpi che sono in principio esatti. L'obiettivo di un metodo *ab initio* è infatti quello di risolvere l'equazione di Schrödinger per un sistema di particelle interagenti in maniera esatta, o almeno in modo sistematicamente migliorabile, partendo da un'hamiltoniana che descriva in maniera realistica l'interazione nel vuoto. Chiaramente sia l'hamiltoniana di interazione, ad oggi non definita in maniera univoca nel caso nucleare, che il metodo many-body con cui implementarla possono essere formulati in una grande varietà di modi.

Per quanto riguarda la ricerca dell'hamiltoniana di base possiamo riportare a titolo di esempio due metodi *ab initio* che seguono approcci differenti. Uno è quello dei

potenziali di Argonne [WSS95], con i quali si è arrivati a descrivere il potenziale di interazione come somma di 18 termini e fittandoli con dati sperimentali relativi a scattering pp , nn e pn e all'energia di legame del deutone per i termini di interazione a due corpi e considerando anche termini di interazione a tre corpi. Esso è chiaramente un metodo di forte impostazione fenomenologica, ma che è stato utile per ottenere risultati prima che fossero ben sviluppate teorie più fondamentali come applicazioni efficaci della QCD.

Un metodo successivo fu infatti [EHM09] quello di una realizzazione efficace della lagrangiana della QCD, basata sulla simmetria chirale, tramite la quale si superano le difficoltà tecniche riscontrate nella determinazione delle proprietà nucleari nel limite a basse energie della QCD, la cui complessità risulta essere proibitiva anche per sistemi a poche particelle. Questo permette di formulare potenziali ispirati alla lagrangiana efficace della QCD dei quali, analogamente ad Argonne e Skyrme, seppure ad un livello diverso, è necessario determinare i coefficienti dei termini di cui sono composti tramite fit. Inoltre i diagrammi che compongono questi potenziali chirali hanno delle divergenze quindi risulta che essi dipendono anche dai parametri introdotti per regolarizzare tali divergenze.

I potenziali di interazione nucleone-nucleone ottenuti possono poi essere implementati nello studio delle proprietà nucleari tramite diversi metodi a molti corpi. Una classe di questi metodi *ab initio* che sono stati applicati anche ai sistemi nucleari sono i metodi *Quantum Monte Carlo* (QMC) [Mar20] i quali sono intrinsecamente stocastici e permettono quindi l'assegnazione di un errore statistico a ciascuna osservabile determinata. Un particolare metodo è quello della *Diffusion Monte Carlo* (DMC) il quale si basa sull'evoluzione in tempo immaginario di una funzione d'onda iniziale nel ground state dell'hamiltoniana d'interesse.

Un'altra tipologia di approccio è costituito dalla *Self Consistent Green Function Theory* (SCGFT), la quale porta ad una soluzione non perturbativa e sistematicamente migliorabile soluzione dell'equazione di Schrödinger basandosi sul concetto di propagatori o funzioni di Green a molti corpi.

Possiamo inoltre fare alcune considerazioni sul limite di applicabilità dei metodi *ab initio*. Da quanto presentato è chiaro che tale limite dipenderà dalla scelta dell'interazione fondamentale e del metodo many-body con cui essa viene implementata. Attualmente è presente un limite superiore nella massa dei sistemi calcolabili comune a tutti questi metodi il quale ne limita l'applicazione a nuclei leggeri per ragioni di complessità computazionale. Va sottolineato che in questa considerazione stiamo facendo riferimento al calcolo delle proprietà di ground-state, mentre restrizioni ulteriori sono presenti nello studio, tramite gli stessi metodi, delle proprietà del sistema in stati eccitati.

1.5 Motivazione del lavoro

Cercando di fare una sintesi del discorso fatto fino a questo punto, abbiamo visto che la complessità e le forti correlazioni tra particelle nell'interazione nucleare hanno richiesto nello studio dei potenziali efficaci per i metodi di campo medio l'implementazione di una dipendenza diretta dalla densità del sistema, portando così un grande interesse sulle EDF e aprendo la strada all'applicazione della DFT ai sistemi nucleari.

Si è quindi osservata la difficoltà nel proseguire con un approccio fenomenologico nello studio delle EDF a causa della grande quantità di termini di cui esse sono costi-

tuite. Il campo dei metodi *ab initio* applicati ai sistemi nucleari si è quindi occupato di superare tale problema partendo dalla formulazione delle interazioni fondamentali tra nucleoni nel vuoto e dalla loro implementazione con metodi many-body. È stato poi riconosciuto un limite di applicabilità di tali metodi entro i nuclei leggeri.

Un interessante problema aperto consiste quindi nel trovare un metodo che riduca la complessità computazionale del problema e che possa essere generale per tutta la carta dei nuclidi. Il presente lavoro si propone di seguire tale direzione, attraverso l'implementazione del metodo di *Inverse Kohn-Sham*, fondato sull'idea, formalizzata nella Sez. 2, per cui le densità nucleari contengono già, almeno in principio, tutte le informazioni rilevanti per ottenere la EDF nucleare. Si passa quindi ad un approccio inverso al problema, Sez. 2.3, attraverso il quale, partendo dalla densità del sistema, è possibile risalire al potenziale efficace di campo medio e successivamente arrivare anche alla EDF. Per compiere quest'ultimo passaggio verso la EDF tuttavia non è sufficiente ottenere un solo potenziale efficace, ma è necessario conoscerne diversi lungo un determinato cammino di densità [LB94; GCS09]. A tale scopo è pensabile che potranno essere utilizzati calcoli *ab initio* per esplorare diversi sistemi molto vicini tra loro in termini della loro densità e costruire così il cammino di potenziali efficaci lungo le densità.

Questo procedimento ha la possibilità di superare i limiti sui nuclei computazionalmente accessibili ai metodi *ab initio* in quanto, come sarà mostrato in Sez. 2, la determinazione della EDF consiste principalmente nella determinazione di un funzionale della densità il quale prenderà il nome di *funzionale universale*, indipendente dal numero di particelle del sistema e dai potenziali esterni. L'idea è quindi di arrivare alla conoscenza delle EDF per nuclei leggeri ed estenderla anche ai nuclei pesanti, prima non accessibili, grazie a tale universalità del funzionale.

Per arrivare alla risoluzione completa del problema, secondo il procedimento sopra riassunto, è chiaro che sono necessari tanti piccoli passi intermedi. Il presente lavoro si occupa di approfondire il particolare delle tecniche di inversione che generano il passaggio densità-potenziale, partendo da quanto già ottenuto per densità sperimentali [Acc+20], e aprendo la strada per quanto riguarda l'applicazione dei metodi a densità *ab initio*.

Capitolo 2

Premesse teoriche

2.1 Teoremi di Hohenberg e Kohn

Il primo passo fondamentale per affrontare i concetti della DFT applicati al caso nucleare è quello di seguire l'intuizione avuta da Hohenberg e Kohn e mostrare che è possibile esprimere l'energia totale di un qualunque sistema fermionico in funzione della densità. Consideriamo il caso di un sistema elettronico, storicamente di primo interesse e la cui scelta non comporta una reale perdita di generalità, definito dall'Hamiltoniana:

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

dove $\hat{T}$ è l'energia cinetica del sistema, $\hat{U}$ è il potenziale di interazione tra gli elettroni e $\hat{V}$ è un generico potenziale esterno, nel caso degli elettroni in una molecola è l'interazione coulombiana con i nuclei, esplicitamente per N elettroni di massa m , interagenti con M nuclei di carica Z_α

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m} + \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i,\alpha}^{N,M} \frac{Z_\alpha e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_\alpha|} \quad (2.1.2)$$

avendo tralasciato nella scrittura l'interazione tra i nuclei per mantenere evidente la forma di (2.1.1). Inoltre grazie all'approssimazione di Born-Oppenheimer è possibile separare l'hamiltoniana elettronica da quella nucleare. In termini degli elettroni è quindi possibile trattare i nuclei come se fossero immobili, utilizzando la conoscenza dell'interazione nucleo-nucleo per avere informazioni sulla disposizione del reticolo atomico e di conseguenza sul potenziale esterno in cui sono immersi gli elettroni.

La funzione d'onda del ground-state di un sistema composto da N fermioni è $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$, dove $\mathbf{x}_i \equiv (\mathbf{r}, s)$ esprime le coordinate di posizione e spin. Esprimiamo quindi la grandezza fondamentale, ossia la densità del sistema di N fermioni

$$\rho(\mathbf{r}_1) = N \int \cdots \int |\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)|^2 ds_1 d\mathbf{x}_2 \cdots d\mathbf{x}_N \quad (2.1.3)$$

variabile delle sole tre coordinate spaziali x , y e z , e rispettante il vincolo

$$\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N \quad (2.1.4)$$

La (2.1.3) equivale alla scrittura più compatta

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

tramite la quale viene definita la funzione d'onda $\psi(\mathbf{r})$ del sistema nello stato fondamentale, come rappresentazione di Schrödinger dello stato $|\Psi\rangle$ nei soli tre gradi di libertà spaziali.

L'obiettivo ora è quello di mostrare che tutte le quantità interessanti del sistema possono essere espresse come funzionali della densità $\rho(\mathbf{r})$ di ground-state. Iniziamo esplicitando i valori di aspettazione degli operatori che costituiscono l'hamiltoniana (2.1.1):

$$T := \langle \Psi | \hat{T} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \right) \psi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} \nabla \psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) \quad (2.1.6)$$

$$U := \langle \Psi | \hat{U} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi^*(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \quad (2.1.7)$$

$$V := \langle \Psi | \hat{V} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) v_{ext}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.1.8)$$

Dalla (2.1.5) possiamo osservare che $\rho(\mathbf{r})$ è un funzionale di $\psi(\mathbf{r})$. Inoltre poiché $v_{ext}(\mathbf{r})$ fissa l'hamiltoniana H abbiamo che $\psi(\mathbf{r})$ è determinata dal potenziale esterno e di conseguenza si deduce che la densità $\rho(\mathbf{r})$ stessa è un funzionale di $v_{ext}(\mathbf{r})$. In [HK64] è inoltre dimostrata la relazione inversa tra la densità $\rho(\mathbf{r})$ e il potenziale esterno $v_{ext}(\mathbf{r})$, arrivando così ad una relazione biunivoca tra di essi.

Un'ulteriore conseguenza di questo risultato è che la funzione d'onda $\psi(\mathbf{r})$ stessa sia un funzionale unico della densità $\rho(\mathbf{r})$. Questo passaggio è necessario per mostrare che lo sono anche l'energia cinetica T e l'energia di interazione U e poter definire:

$$F[\rho] := \langle \Psi | \hat{T} + \hat{U} | \Psi \rangle = T[\rho] + U[\rho] \quad (2.1.9)$$

chiamato *funzionale universale*, in quanto indipendente dal numero di particelle e dal potenziale esterno. Siamo quindi arrivati ad aver dimostrato il primo teorema di Hohenberg e Kohn:

Teorema 1 *Dato un sistema di N elettroni interagenti in un potenziale esterno v_{ext} , esiste una corrispondenza biunivoca tra l'energia totale in presenza di v_{ext} , definita come funzionale della densità ρ delle particelle, e la densità stessa.*

Possiamo quindi esprimere l'energia totale del sistema come

$$E[\rho] := \langle \Psi | \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} | \Psi \rangle = F[\rho] + \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) v_{ext}(\mathbf{r}) \quad (2.1.10)$$

Osserviamo che, non avendo compiuto alcuna approssimazione, per la corretta densità $\rho(\mathbf{r})$ il funzionale $E[\rho]$ equivale esattamente all'energia di ground-state. Avendo inoltre dimostrato sopra la corrispondenza biunivoca tra $\psi(\mathbf{r})$ e la densità $\rho(\mathbf{r})$ abbiamo che l'energia totale (2.1.10) è anche $E[\psi[\rho]]$. Essendo noto che in termini della funzione d'onda Ψ tale funzionale assuma il valore minimo in corrispondenza del ground-state del sistema, arriviamo al completamento del primo teorema tramite il secondo teorema di Hohenberg e Kohn:

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

Capiamo dunque la grande potenzialità del risultato a cui si è arrivati: volendo determinare l'energia del ground-state del sistema si può utilizzare un principio variazionale, agendo su $\rho(\mathbf{r})$ la quale è una funzione di sole 3 coordinate, a differenza della funzione da cui siamo partiti $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ la quale (senza contare i gradi di libertà di spin) dipende da $3N$ coordinate.

Osserviamo che i teoremi di Hohenberg e Kohn sono generali per un sistema di fermioni per cui sono senza sforzi utilizzabili per studiare il problema nucleare. L'unica differenza consiste nell'avere come U l'interazione nucleare e, poiché il nucleo è un sistema autointeragente, non è presente alcun potenziale esterno v_{ext} .

2.2 Equazioni di Kohn-Sham

L'energia del sistema è determinata in maniera esatta dall'espressione (2.1.10), per cui il problema della determinazione dell'energia E e della densità ρ del ground-state in un dato potenziale esterno v_{ext} consiste unicamente nella minimizzazione di un funzionale della funzione densità. Le difficoltà di tale procedimento dipendono sostanzialmente dalla determinazione del funzionale universale $F[n]$.

Un possibile approccio diretto, è quello di perseguire direttamente la risoluzione dell'equazione di Eulero-Lagrange

$$\mu = v_{ext}(\mathbf{r}) + \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \quad (2.2.1)$$

ottenuta, si veda Appendice A, minimizzando il funzionale $E[\rho]$ con il vincolo

$$\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N \quad (2.2.2)$$

Kohn e Sham nel 1965 proposero un valido metodo indiretto [KS65] per risolvere tale problema a partire dall'innovativa osservazione secondo cui un sistema di N fermioni interagenti in un certo potenziale esterno può essere studiato in maniera equivalente ad un sistema di N fermioni *non* interagenti in un potenziale efficace. Tale equivalenza può essere mostrata senza approssimazioni, iniziando con il riscrivere il *funzionale universale* come

$$F[\rho] = T_s[\rho] + E_{xc}[\rho] + J[\rho] \quad (2.2.3)$$

dove

$$E_{xc}[\rho] := T[\rho] - T_s[\rho] + U[\rho] - J[\rho] \quad (2.2.4)$$

è l'*energia di scambio e correlazione* la quale contiene la differenza tra la reale energia cinetica T del sistema e la nuova energia cinetica del sistema *non interagente* T_s e il contributo non classico all'energia potenziale coulombiana dato dalla differenza tra $U[\rho]$ e

$$J[\rho] = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.2.5)$$

L'equazione di Eulero-Lagrange (2.2.1) si presenta ora nella forma

$$\mu = v_{eff}(\mathbf{r}) + \frac{\delta T_s[\rho]}{\delta \rho} \quad (2.2.6)$$

dove fino a questo punto è stato compiuto solamente un riarrangiamento delle grandezze, avendo definito il potenziale efficace

$$v_{eff}(\mathbf{r}) = v_{ext}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho} + \frac{\delta J[\rho]}{\delta \rho} \quad (2.2.7)$$

dando così la possibilità di osservare che la (2.2.6) è la stessa equazione che si sarebbe ottenuta se si fosse calcolato il minimo del funzionale energia $E[\rho]$ per un sistema non interagente ($F[\rho] = T_s[\rho]$) e soggetto al potenziale esterno $v_{eff}(\mathbf{r})$. L'idea di Kohn e Sham possiamo quindi vedere che è consistita nell'isolare una nuova componente di energia cinetica T_s , relativa ad un sistema efficace, la quale può essere descritta come

$$T_s[\rho] = \sum_{i=1}^N \langle \phi_i | -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} | \phi_i \rangle \quad (2.2.8)$$

con il vincolo

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.2.9)$$

dove i $\phi_i(\mathbf{r})$ sono chiamati *orbitali di Kohn-Sham* e sono accessori di questo metodo, in quanto non hanno un significato fisico, ma servono per costruire il sistema non interagente.

Vogliamo ora trovare le equazioni con cui possiamo descrivere il sistema, formulato in questo nuovo schema non interagente. Determiniamo variazionalmente il minimo del funzionale energia (2.1.10), imponendo

$$\delta E = 0 \quad (2.2.10)$$

e aggiungendo anche la condizione di ortogonalità tra gli orbitali

$$\int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) = \delta_{ij} \quad (2.2.11)$$

la quale garantisce anche la corretta normalizzazione della densità. Infatti se vale la (2.2.11) si trova anche che

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta_{ii} = N \quad (2.2.12)$$

Trattandosi quindi di un problema di minimizzazione vincolata, introduciamo la condizione (2.2.11) in (2.2.10) tramite i moltiplicatori di Lagrange ϵ_{ij} e ottenendo

$$\delta \left(E - \sum_{i,j=1}^N \epsilon_{ij} \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) \right) = 0 \quad (2.2.13)$$

Scegliamo quindi di effettuare la variazione secondo la funzione $\phi_i^*(\mathbf{r})$, sapendo inoltre che vale la seguente relazione, dimostrata in Appendice A:

$$\frac{\delta}{\delta f} \int d\mathbf{x} g(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \quad (2.2.14)$$

da cui discende facilmente che

$$\frac{\delta \rho}{\delta \phi_i^*} = \phi_i \quad \frac{\delta}{\delta \phi_i^*} = \frac{\delta \rho}{\delta \phi_i^*} \frac{\delta}{\delta \rho} = \phi_i \frac{\delta}{\delta \rho} \quad (2.2.15)$$

Otteniamo quindi che

$$\begin{aligned} \frac{\delta E}{\delta \phi_i^*} &= \phi_i \frac{\delta E}{\delta \rho} \\ &= \phi_i \frac{\delta}{\delta \rho} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \Delta \phi_i(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) v_{ext}(\mathbf{r}) + E_{xc}[\rho] + J[\rho] \right) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + v_{ext}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho} + \frac{\delta J[\rho]}{\delta \rho} \right) \phi_i(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

e

$$\frac{\delta}{\delta \phi_i^*} \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) = \phi_j(\mathbf{r}) \quad (2.2.17)$$

Di conseguenza le equazioni di Eulero-Lagrange (2.2.13) diventano

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + v_{ext}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho} + \frac{\delta J[\rho]}{\delta \rho} \right) \phi_i(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \epsilon_{ij} \phi_j(\mathbf{r}) \quad (2.2.18)$$

Inoltre poiché gli operatori nel membro di sinistra sono hermitiani si ha che ϵ_{ij} è una matrice hermitiana e può quindi essere diagonalizzata tramite l'azione di una matrice unitaria. È inoltre vero che tale trasformazione lascia invariato il determinante di Slater degli orbitali trasformati, ossia la funzione d'onda del sistema, implicando quindi l'invarianza anche della densità stessa. Poiché abbiamo visto che la densità, invariata, determina tutte le proprietà fisiche del sistema, deduciamo che anche gli operatori dell'hamiltoniana efficace al primo membro resteranno invariati. In questo nuovo sistema di orbitali le (2.2.18) diventano le *equazioni di Kohn-Sham*

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v_{KS}[\rho] \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}) \quad (2.2.19)$$

con

$$v_{KS}[\rho] = v_{ext}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho} + \frac{\delta J[\rho]}{\delta \rho} \quad (2.2.20)$$

potenziale efficace di Kohn-Sham. Se una forma del funzionale energia di scambio e correlazione $E_{xc}[\rho]$ viene assunta, allora le equazioni di Kohn-Sham possono essere risolte e la densità ρ trovata. Una approssimazione possibile è la *Local Density Approximation* (LDA), la quale considera il funzionale $E_{xc}[\rho]$ come dipendente solo da valori *locali* della densità, contro invece la possibilità di dipendere anche dai valori della densità in punti vicini, ad esempio tramite gradienti della densità stessa.

2.3 Metodo IKS

2.3.1 Metodo vLB

Si vuole ora mostrare il processo di inversione *Inverse Kohn-Sham* seguendo il metodo vLB, introdotto nel 1994 da R. van Leeuwen e E. J. Baerends in [LB94]. Per farlo è prima necessario chiarire la formulazione dell'equazione di Kohn-Sham che si vuole invertire ed esplicitare la costruzione della densità $\rho(\mathbf{r})$ a partire dagli orbitali di Kohn-Sham.

Problema diretto Nell'ipotesi di simmetria sferica del sistema, possiamo ridurre i gradi di libertà del problema e passare dall'equazione di Kohn-Sham (2.2.19) alla versione ridotta radiale

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \right] u_i(r) = \epsilon_i u_i(r) \quad (2.3.1)$$

con $u_i(r)$ componenti radiali ridotte delle autofunzioni ottenute dall'equazione di Kohn-Sham, secondo la relazione

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \frac{u_{nlj}(r)}{r} \left[Y_l(\theta, \phi) \otimes \chi_{\frac{1}{2}} \right]_{jm} \quad (2.3.2)$$

dove i indicizza gli orbitali di Kohn-Sham $\phi_i(r)$, definendolo come $i \equiv (n, l, j, m)$, con n numero quantico principale, l momento angolare orbitale, j momento angolare totale ed m momento magnetico totale. Nel caso di simmetria sferica possiamo inoltre esprimere la densità ρ come funzione radiale, dipendente solo dalla componente $u_i(r)$ delle autofunzioni. Assumiamo inoltre che il contributo di spin-orbita al potenziale non influisca in maniera significativa sulle autofunzioni, altrimenti splittate relativamente ai due numeri quantici del momento angolare totale $\mathbf{J}$: $j = l - \frac{1}{2}$ e $j = l + \frac{1}{2}$. Questo fatto è verificabile tramite le autofunzioni relative al potenziale di Woods-Saxon confrontandole tra il caso in cui il termine di spin-orbita venga trascurato e quello in cui esso venga considerato, permettendo così una trattazione perturbativa al primo ordine del contributo di spin-orbita: le energie cambiano mentre le autofunzioni rimangono imperturbate.

Iniziamo con il sostituire le $\phi_i(\mathbf{r})$ nella densità (2.2.9)

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N_{orb}} \left| \frac{u_{nlj}(r)}{r} \left[Y_l(\theta, \phi) \otimes \chi_{\frac{1}{2}} \right]_{jm} \right|_{i=(n,l,j,m)}^2 \quad (2.3.3)$$

Integrando poi su tutto l'angolo solido e utilizzando la seguente normalizzazione delle funzioni armoniche sferiche : $\int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = 1$, otteniamo

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{njl m} u_{nlj}^2(r) \quad (2.3.4)$$

esplicitando poi la degenerazione $2j + 1$ su m abbiamo degli orbitali definiti dal set di numeri $\alpha \equiv (n, l, j)$ e sommando su tutti gli orbitali distinti troviamo

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) u_{\alpha}^2(r) \quad (2.3.5)$$

Poiché abbiamo verificato che sebbene sia presente uno splitting dei livelli energetici su j le relative autofunzioni non cambiano, avremmo ottenuto lo stesso risultato se avessimo utilizzato la base disaccoppiata (l, s) tenendo conto della degenerazione $2(2l + 1)$.

Problema inverso Vogliamo ora ottenere il potenziale $U(r)$ quindi invertiamo l'equazione (2.3.1) e, definendo $U_l \equiv \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$, otteniamo

$$U(r) = \frac{1}{4\pi r^2 \rho(r)} \sum_{i=0}^{N_{orb}} \left[n_i u_i(r) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - U_l \right) u_i(r) + \epsilon_i n_i u_i^2(r) \right] \quad (2.3.6)$$

Per risolvere l'equazione (2.3.9) possiamo implementarla sotto forma di equazione ricorsiva nel modo seguente: determiniamo inizialmente un'equazione analoga alla 2.3.6 sostituendo $\rho(r)$ con una densità *target* $\tilde{\rho}(r)$ la quale coinciderà poi con la densità inserita in input nell'algoritmo. Essa potrà avere origine sperimentale, come da esperimenti di scattering, o da calcoli *ab initio*. Otteniamo quindi

$$\tilde{U}(r) = \frac{1}{4\pi r^2 \tilde{\rho}(r)} \sum_{i=0}^{N_{orb}} \left[n_i u_i(r) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - U_l \right) u_i(r) + \epsilon_i n_i u_i^2(r) \right] \quad (2.3.7)$$

Notiamo poi che la sommatoria al numeratore è chiaramente uguale a $4\pi r^2 \rho(r) U(r)$, per cui si ottiene

$$\tilde{U}(r) = \frac{\rho(r)}{\tilde{\rho}(r)} U(r) \quad (2.3.8)$$

Nell'ottica dello scrivere una relazione ricorsiva, possiamo chiamare $U^{(k+1)} := \tilde{U}(r)$ in quanto potenziale ottenuto allo step successivo (k+1-esimo) rispetto a $U^{(k)} := U(r)$, da cui:

$$U^{(k+1)}(r) = \frac{\rho^{(k)}(r)}{\tilde{\rho}(r)} U^{(k)}(r) \quad (2.3.9)$$

Il calcolo di $\rho^{(k)}(r)$ ad ogni step k-esimo dell'algoritmo identifica la parte di *problema diretto* del metodo vLB, come spiegato nel paragrafo precedente. Il significato fisico della relazione (2.3.9) è il seguente: la densità $\tilde{\rho}(r)$ è la densità a cui tende (*target*) la densità $\rho^{(k)}(r)$ ad ogni step k-esimo dell'algoritmo. Infatti notiamo che nel caso in cui $\rho^{(k)}(r) > \tilde{\rho}(r)$ il potenziale $U^{(k+1)}(r)$, se positivo, cresce rispetto a $U^{(k)}(r)$ così che all'iterazione successiva l'essere maggiormente repulsivo comporta la diminuzione della densità. In modo analogo funziona anche il caso $\rho^{(k)}(r) < \tilde{\rho}(r)$. E' chiaro che nel caso di un potenziale attrattivo, come nel caso nucleare, tale relazione non è applicabile.

Quindi, come riportato da [JW18], possiamo modificare tale relazione, mantenendo le relazioni di crescita-decrescita del potenziale in funzione della densità, tramite

$$U^{(k+1)}(r) = U^{(k)}(r) + \gamma \frac{\rho^{(k)}(r) - \tilde{\rho}(r)}{\tilde{\rho}(r)} \quad (2.3.10)$$

con γ prefattore, su cui si può intervenire manualmente ed il cui compito è quello di impedire grandi oscillazioni nel potenziale. Permette infatti di scegliere il peso da assegnare al contributo al nuovo potenziale $U^{(k+1)}(r)$ dato dal valore del potenziale allo step precedente $U^{(k)}(r)$ e dalla differenza della densità da quella *target*. Si osserva quindi che l'equazione (2.3.10) è applicabile anche nel caso di potenziale attrattivo.

La condizione di convergenza per cui si considera soddisfacente il potenziale ottenuto è data da

$$\max_r |U^{(k+1)}(r) - U^{(k)}(r)| < \epsilon \quad (2.3.11)$$

dove ϵ è anch'esso un parametro su cui si può agire manualmente, al pari di γ .

Capitolo 3

Struttura del codice numerico

Come visto nella sezione 2.3 il metodo IKS si propone di invertire l'equazione di Kohn-Sham ridotta per ricavare, come indicato nell'equazione (2.3.9), il potenziale efficace di Kohn-Sham. In questa sezione verranno mostrati i metodi computazionali utilizzati per implementare l'inversione, analizzando il problema scomposto nelle due parti che abbiamo già definito: il problema *diretto*, il quale consiste nella risoluzione di un'equazione differenziale quale è l'equazione di Schrödinger (2.3.1) per arrivare alla composizione della densità numerica totale, e il problema *inverso*, il quale si occupa di ricavare un nuovo potenziale partendo dalla densità ricavata dal problema *diretto*.

Lo schema dell'algoritmo che è stato seguito è rappresentato nel seguente flowchart:

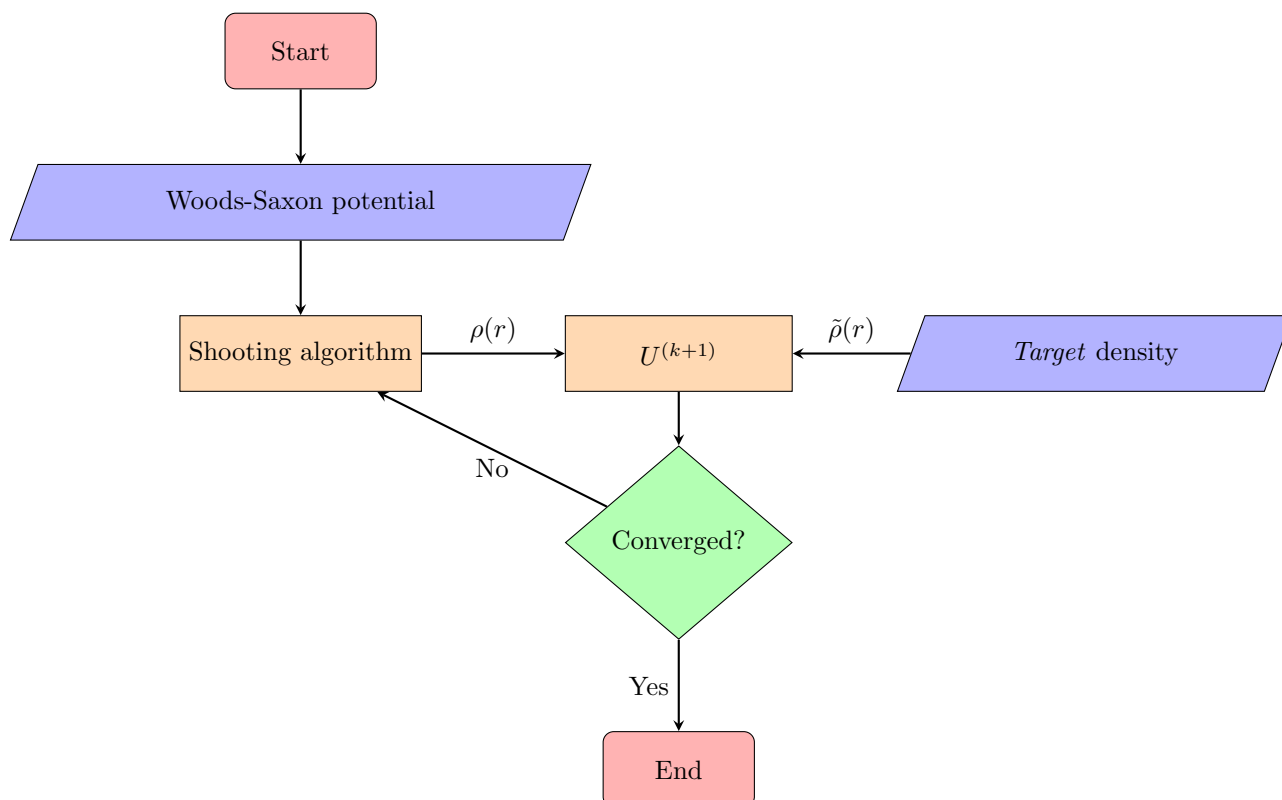


Figura 3.1: Flowchart dell'algoritmo del metodo vLB.

3.1 Problema diretto: dal potenziale alla densità.

La parte di problema *diretto* del metodo vLB consiste nell'avere in input un potenziale di particella singola e nel restituire in output la densità numerica delle particelle. Alla prima iterazione il potenziale in input è il potenziale di Woods-Saxon (1.1.2) (nel caso dei protoni viene aggiunto anche potenziale coulombiano, mostrato in Sez. 3.1.2), mentre alle iterazioni successive viene preso in input il potenziale $U^{(k+1)}$ ottenuto dall'inversione (2.3.10). Per eseguire tale compito lo strumento è l'algoritmo di shooting, che verrà ora descritto, il quale dato il potenziale efficace di singola particella, risolve l'equazione di Schrödinger per ciascun orbitale $\phi_i(r)$. Dopodiché viene composta la densità secondo la (2.3.5).

3.1.1 Algoritmo di shooting

L'algoritmo di shooting ha lo scopo di risolvere l'equazione di Schrödinger (2.3.1), ottenendo simultaneamente sia gli autovalori ϵ_i che le autofunzioni u_i . Le condizioni al contorno da imporre sono

$$\lim_{r \rightarrow 0} u(r) = r^{l+1} \quad (3.1.1)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} u'(r) = (l+1)r^l \quad (3.1.2)$$

e la condizione di convergenza dell'algoritmo è la seguente:

$$|u(r_{max})| < \epsilon \quad (3.1.3)$$

la quale impone che l'autofunzione calcolata si annulli entro la "distanza dal centro" r_{max} . La giustificazione fisica di questa richiesta risiede nella finitezza del raggio del nucleo e nella natura a breve range dell'interazione nucleare. È di conseguenza necessario scegliere la quantità r_{max} in modo che tale ipotesi sia valida.

Fino al raggiungimento della condizione (3.1.3) gli step che vengono iterati sono i seguenti:

1. Vengono scelti arbitrariamente due autovalori *test* E_1, E_2 e si risolvono le relative equazioni di Schrödinger (del tipo (2.3.1)) tramite il metodo di Runge-Kutta ottenendo le relative autofunzioni $u_1(r)$ e $u_2(r)$.
2. Si verifica che le due autofunzioni ottenute siano discordi in r_{max} : $u_1(r_{max}) \cdot u_2(r_{max}) < 0$. Se ciò non è verificato è necessario cambiare gli autovalori E_1, E_2 . Il metodo utilizzato è stato quello di partire da un valore di -50 MeV e -45 MeV, più basso della stima dell'energia del livello $1s$ (per i neutroni del ^{208}Pb vale circa -40 MeV) in modo che la ricerca copra completamente il range di energie per tutti i nuclei indagati, per i due autovalori e poi ad ogni iterazione, nel caso fossero ancora concordi, aumentare entrambi di una certa quantità finché il prodotto non cambia di segno ed è possibile proseguire nell'algoritmo.
3. Si calcola, sempre tramite Runge-Kutta, l'autofunzione u_t relativa a $E_t = \frac{E_1 + E_2}{2}$ e se ne valuta il segno in r_{max} .
4. Si sostituisce con E_t l'autovalore relativo all'autofunzione (u_1 o u_2) concorde a u_t in r_{max} , così da avere pronti per l'iterazione successiva due autovalori di energia relativi a due autofunzioni discordi le quali stanno tendendo progressivamente a zero nel punto r_{max} .

Inoltre un'importante semplificazione sta nell'osservare che non è mai necessario, se non alla prima iterazione, ripetere i punti 1 e 2 dell'algoritmo, dato che dopo aver trovato due autofunzioni discordi in r_{max} , l'autovalore E_t e la relativa autofunzione u_t vanno a sostituire rispettivamente l'autovalore e l'autofunzione "concordi", cosicché non sia più necessario verificare che il prodotto delle autofunzioni nel punto sia negativo. Rimarrà dunque solamente da calcolare i nuovi E_t e u_t , per cui è chiaro che basta ripartire dal punto 3.

Va notato inoltre che un'assunzione di base che è stata fatta è la monotonia dei valori delle autofunzioni in r_{max} negli autovalori. Stiamo infatti assumendo che nel momento in cui venga sostituito l'autofunzione relativa all'autovalore medio E_t essa si sia avvicinata maggiormente allo zero rispetto a quanto lo era l'autofunzione di cui ha preso il posto. Si osserva quindi che date due autofunzioni discordi in r_{max} l'algoritmo è sicuramente convergente. Nel nostro caso tale ipotesi è confermata, in quanto l'andamento asintotico, che quindi si ritrova anche in r_{max} , è $\sim e^{\alpha E^{1/2} r}$.

3.1.2 Potenziale coulombiano

Come già accennato all'inizio di Sez. 3.1 nel caso dei protoni è necessario aggiungere al potenziale in input alla prima iterazione dell'algoritmo di inversione l'interazione elettrostatica. Dobbiamo quindi descrivere il potenziale coulombiano associato al campo medio elettrostatico del nucleo. L'approssimazione che possiamo fare è di considerarlo pari al potenziale generato da una sfera di carica di raggio R_N , ottenendo così

$$V(r) = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{R_N} \left(3 - \frac{r^2}{R_N^2} \right), & \text{se } r < R_N \\ \frac{Ze^2}{r}, & \text{se } r > R_N \end{cases} \quad (3.1.4)$$

Inoltre una correzione utilizzata per il raggio nucleare, riportata in [SJP05], è data dalla sostituzione di R_N con

$$R'_N = R_N \sqrt{\frac{1 + (5s^2/2R_N^2)}{1 + (3s^2/4R_N^2)}} \quad (3.1.5)$$

dove $s = 2.0$ fm.

Capitolo 4

Risultati

4.1 Problema inverso: dalla densità al potenziale.

Il problema inverso come è stato già mostrato in dettaglio nella sezione 2.3.1 viene risolto tramite la formulazione dell'equazione ricorsiva (2.3.10). Vogliamo ora riportare qualche osservazione tecnica sulla realizzazione di tale metodo.

La prima osservazione riguarda l'input della densità *target*. Essa a priori riporta dati relativi a valori della variabile radiale r non equispaziati, mentre il metodo di Runge-Kutta, utilizzato per trovare le autofunzioni necessarie a costruire la densità, può solo determinare valori equispaziati. È stata quindi applicata preliminarmente una spline cubica della densità *target*, così da interpolarne i punti ed estrapolarne altri equispaziati, in modo da poter confrontare $\rho(r)$ e $\tilde{\rho}(r)$ punto per punto.

La seconda osservazione riguarda invece un effetto collaterale caratteristico del metodo che si sta utilizzando per ottenere computazionalmente il potenziale a partire dalla densità. Il fenomeno a cui si sta facendo riferimento è la caduta del potenziale a valori negativi fuori scala in prossimità del limite r_{max} del range in cui si sta svolgendo il metodo di inversione, come mostrato in Figura 4.1.

La causa di tale comportamento è infatti un effetto di bordo dato dalla finitezza causato dalla risoluzione dell'equazione di Schrödinger in uno spazio finito. L'algoritmo di shooting descritto sopra impone infatti che le autofunzioni siano nulle entro r_{max} , tramite il vincolo (3.1.3). Se la ϵ è abbastanza piccola è chiaro che il valore della densità $\rho(r)$ in quel punto sarà sicuramente inferiore al valore della densità *target* nello stesso, e poiché il valore del potenziale è calcolato tramite (2.3.10) possiamo vedere che il contributo a $U^{(k+1)}$ nell'intorno di r_{max} sarà sempre negativo.

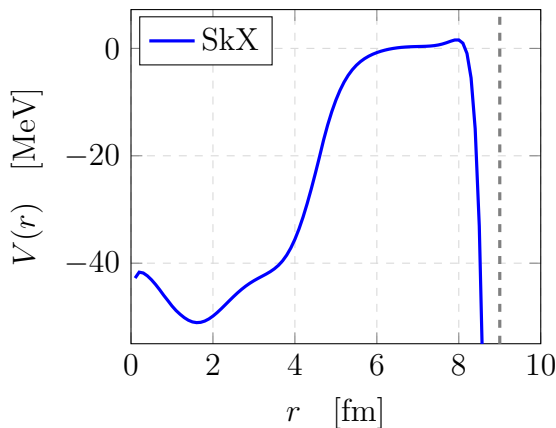


Figura 4.1: Effetti di bordo ben visibili per il potenziale nucleare IKS per i neutroni del ^{40}Ca calcolato con un box di 9 fm a partire dalla densità HF-SkX.

4.2 Diffusion Monte Carlo - AV4'

Presentiamo ora i risultati relativi all'inversione delle equazioni di Kohn-Sham a partire da densità calcolate con il metodo della Diffusion Monte Carlo, presentato in Sez. 1.4, con l'uso dell'interazione AV4'.

I metodi Monte Carlo sono intrinsecamente statistici, di conseguenza ciascun punto delle densità ottenute dai calcoli *ab initio* sarà equipaggiato di un relativo errore statistico. In **Figura 4.2** viene mostrato l'andamento dell'errore relativo al variare del raggio, prendendo a titolo di esempio la densità neutronica del ^{40}Ca .

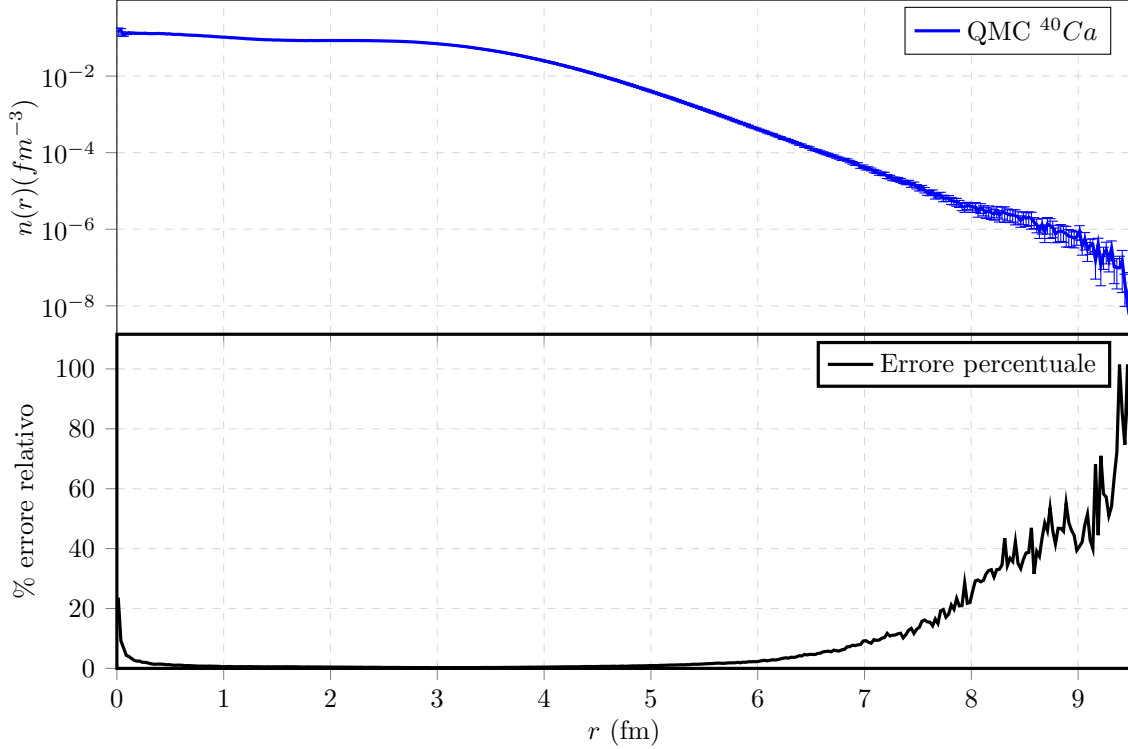


Figura 4.2: Pannello superiore: andamento in scala logaritmico della densità Monte Carlo neutronica del ^{40}Ca con bande di errore. Pannello inferiore: andamento dell'errore relativo.

Questa figura è indicativa del fatto che i calcoli Monte Carlo portino una grande incertezza nei punti di raggio superiori agli 8 fm, rendendoli in partenza poco affidabili. La possibilità è quindi quella di fittare la densità in modo da definirne il profilo con continuità e tenendo conto degli errori su ogni punto.

La prima modalità è stata quella di utilizzare la funzione `csaps()` di MATLAB per effettuare uno smooth della densità. Prendendo in input n coppie di punti (x_i, y_i) e i relativi pesi w_i tale funzione restituisce una spline cubica f che minimizza

$$p \sum_{j=1}^n w_j |y_j - f(x_j)|^2 + (1 - p) \int \lambda(t) |D^2 f(t)|^2 dt \quad (4.2.1)$$

dove p ($0 \leq p \leq 1$) è il parametro che pesa il contributo al fit del primo e del secondo termine i quali corrispondono rispettivamente alla misura dell'errore commesso nel fit e alla misura della ruvidezza della curva f . I casi estremi sono $p = 0$, il cui il risultato

è la retta data dai minimi quadrati, e $p = 1$ il quale consiste in una semplice spline cubica che per definizione passa lungo tutti i punti.

Mostriamo quindi l'esito ottenuto nello smoothing della densità AV4' dei neutroni del ^{40}Ca riportandolo in **Figura 4.3**. Il valore ottimale trovato per il parametro p , applicabile con successo anche a diversi nuclei, è stato $p = 0.98$.

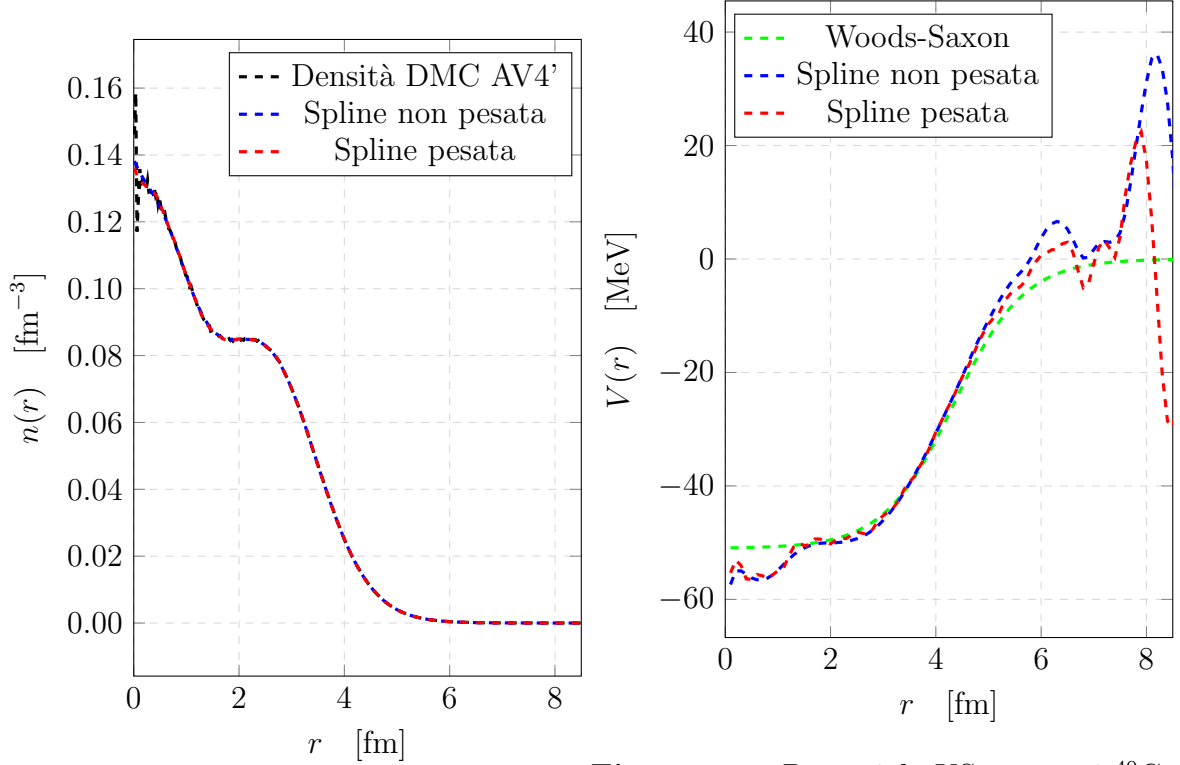


Figura 4.3: Densità AV4' neutroni ^{40}Ca ottenuto dall'inversione di densità lisciate tramite spline cubiche.

Figura 4.4: Potenziale KS neutroni ^{40}Ca

In **Figura 4.4** sono riportati i potenziali efficaci ottenuti tramite inversione di Kohn-Sham nel caso in cui lo smoothing tramite spline sia effettuato tenendo conto, o meno, dei pesi statistici sui punti. Viene mostrato anche il potenziale di Woods-Saxon, descritto dalle formule (1.1.2) e (1.1.3) con lo scopo di confrontare le proprietà dei potenziali ottenuti con quelle di un potenziale utilizzato con successo come modello per il campo medio nucleare, tuttavia ricordando che i potenziali efficaci di Kohn-Sham contengono in più anche gli effetti di scambio e correlazione del sistema fermionico.

Partendo dalla regione interna del nucleo, ossia per distanze inferiori alla stima empirica del raggio del ^{40}Ca , $R = r_0 A^{1/3} = 4.343$ fm, possiamo osservare una riproduzione realistica dell'interno di una buca di potenziale. Confrontando con la **Figura 4.3** è possibile ipotizzare che lo scostamento del potenziale di KS dall'andamento uniforme di Woods-Saxon per $r < 2$ fm sia da attribuirsi al picco rilevato nella densità. Al crescere della distanza dal centro osserviamo successivamente una buona riproduzione della transizione del potenziale a livello della superficie nucleare.

Di conseguenza possiamo osservare che le problematiche nella riproduzione del potenziale efficace sono sostanzialmente individuate all'esterno del nucleo. Il valore infatti che il potenziale efficace nucleare deve assumere oltre la superficie nucleare è zero, a causa della sua natura di interazione a breve range. È noto che il potenziale di KS e i relativi autovalori ottenuti tramite il metodo di inversione siano definiti a meno di

una costante additiva. Per poter realizzare un confronto utile tra potenziali è quindi necessario scegliere un'energia di riferimento. Nel caso delle densità Monte Carlo è stata considerata come riferimento per ciascun nucleo la propria energia di separazione sperimentale, in modo da poter traslare il potenziale e far coincidere con essa l'ultimo autovalore relativo agli orbitali di Kohn-Sham.

La prima ipotesi che è ragionevole formulare è che tale comportamento sia dipendente da quanto mostrato in Figura 4.2, ossia che le anomalie riportate dalla densità Monte Carlo nella regione da circa 7 fm in poi siano inevitabilmente trasmesse ai potenziali efficaci attraverso l'inversione.

Alla luce di queste considerazioni preliminari possiamo chiarire la direzione che si vuole seguire nello studio delle densità Monte Carlo AV4' e del potenziale efficace ad essa associato. Il buon andamento del potenziale limitato alla regione interna del nucleo mostrata in **Figura 4.4** e i problemi all'esterno portano alla necessità di una ricostruzione degli andamenti asintotici delle densità Monte Carlo tramite fit, avendo come metro di giudizio il comportamento asintotico dei potenziali ad esse associate.

4.2.1 Fit delle densità

È chiaro che nello studio delle densità Monte Carlo va tenuto conto della loro natura statistica. È stato inoltre mostrato che una spline, anche se pesata sugli errori, riproduce un buon potenziale entro la superficie del nucleo, ma presenta problemi nella regione esterna, che ricordiamo per avere un senso fisico deve assumere valori asintoticamente nulli.

Una possibilità è quindi quella di eseguire un fit della densità in modo da ricalcare al meglio la regione interna della densità, la quale come mostrato in **Figura 4.4** riproduce ben il potenziale tramite inversione, e tracciare la densità all'esterno del nucleo con un andamento noto che ci si aspetti dia luogo ad un potenziale asintoticamente nullo. Nell'applicazione dei metodi di inversione IKS a densità di origine sperimentale [Sca18; Acc+20] una classe di curve molto utilizzata è quella delle *Sum Of Gaussians* (SOG), le quali riproducono molto bene e in maniera model-independent il profilo delle densità all'interno del nucleo. Sono tuttavia critiche per quanto riguarda l'andamento fuori dal nucleo: il potenziale efficace che dà luogo ad una densità di tipo gaussiano è un potenziale armonico e di conseguenza è impossibile ottenere un andamento asintoticamente nullo tramite inversione. L'accortezza nel loro utilizzo deve quindi essere quella di centrarle nella regione interna delle densità, assicurandosi del fatto che il loro contributo alla coda sia trascurabile.

Una seconda tipologia di curve utilizzata per riprodurre le densità nucleari sono le distribuzioni di Fermi, le quali possono variare nel numero dei parametri presenti. Riportiamo le espressioni per le *Two-parameter Fermi model* (2pF) e le *Three-parameters Fermi model* (3pF)

$$\begin{aligned}\rho_{2pF}(r) &= \frac{\rho_0}{1 + \exp\frac{r-c}{z}} \\ \rho_{3pF}(r) &= \frac{\rho_0 \left(1 + w\frac{r^2}{c^2}\right)}{1 + \exp\frac{r-c}{z}}\end{aligned}\tag{4.2.2}$$

le quali sono già state fittate a densità sperimentali, dando la possibilità in [DDD87] di tabulare i valori dei coefficienti c, z, w . Rispetto alle curve SOG le distribuzioni di Fermi

hanno la possibilità di delineare degli andamenti potenzialmente accettabili per le code della densità. L'equazione di Schrödinger per una particella in una buca di potenziale di forma generica dà infatti luogo a una funzione d'onda con andamento esponenziale nelle regioni in cui il potenziale è nullo.

Nel presente lavoro la scelta delle forme funzionali per i fit è stata determinata dalla necessità di evitare valori negativi per la densità fittata dopo un certo raggio. Il problema, oltre a riguardare il significato fisico della densità stessa, sorge nell'iterazione della relazione (2.3.7), la quale in presenza di valori negativi della densità target $\tilde{\rho}$ porta l'algoritmo a divergere. Si è dovuto quindi studiare in maniera specifica i fit per ciascuna densità, senza ottenere così una forma generale per fittare tutti i tipi di nuclei con densità positive fino a grandi raggi. Ricordiamo che tale richiesta è necessaria in quanto l'interesse è ora posto sull'andamento della densità, e di conseguenza del potenziale efficace, nella regione esterna al nucleo.

Un'ultima considerazione necessaria riguarda i pesi dei fit. Essendo i punti ρ_i , con i indice dei valori discreti della densità, da fittare equipaggiati di un errore σ_i , la ricerca di una curva che segua tali punti dovrà dipendere dal peso di quest'ultimi. Il modo tipicamente utilizzato per definire i pesi è

$$w_i = \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (4.2.3)$$

ponendoli inversamente proporzionali alla varianza del rispettivo punto. Per conoscere l'andamento dei pesi possiamo osservare la dimensione degli errori assoluti σ_i nei punti della densità da fittare. La **Figura 4.5** mostra che gli errori assoluti hanno un andamento monotono fortemente decrescente nel raggio che rispecchia, giustamente, l'andamento della densità stessa. Di conseguenza è chiaro che i pesi w_i raggiungeranno i valori massimi nella coda della densità. Poiché la ricerca di una curva fittante la densità coincide con la ricerca della curva che minimizza la somma dei residui

$$\tau_i = |y_i - y_{fit,i}| \cdot w_i \quad (4.2.4)$$

con i che indicizza i punti della densità, vediamo che a parità di scarto $|y_i - y_{fit,i}|$ i punti sulla coda danno il contributo maggiore come residui. È quindi chiaro che i punti sulla coda del potenziale hanno una rilevanza molto maggiore rispetto ai punti sull'interno in termini di fit.

Questa osservazione è interessante nel momento in cui viene collegata alla problematica dell'andamento asintotico del potenziale efficace: come verrà mostrato dai grafici nella sezione successiva la possibilità di seguire con precisione la coda della densità e delinearne un andamento esponenziale non è sufficiente.

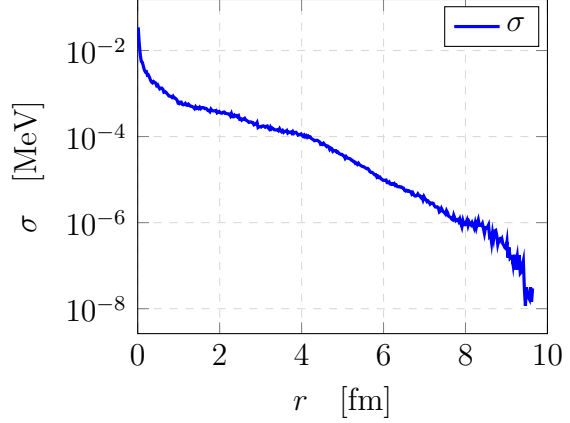


Figura 4.5: Andamento dell'errore assoluto σ nel caso del ^{40}Ca .

La possibilità di allontanarsi con il fit dalla coda della densità può essere realizzata cambiando i pesi assegnati ai punti. Verrà quindi mostrato che scegliendo

$$w'_i = \frac{1}{\sigma_i} \quad (4.2.5)$$

come pesi per il fit è possibile continuare a riprodurre con successo il potenziale efficace all'interno del nucleo e sfruttare la maggiore libertà dei punti sulla coda per ottenere buoni andamenti del potenziale anche all'esterno.

É quindi conveniente distinguere i due tipi di fit utilizzando la denominazione

- Fit A : fit eseguito utilizzando il peso w .
- Fit B : fit eseguito utilizzando il peso w' .

4.2.2 Dalle densità ai potenziali: grafici

Mostriamo ora i grafici relativi ai potenziali di Kohn-Sham ottenuti per i fit sopra descritti.

CALCIO 40 Le forme funzionali dei fit utilizzati per la densità neutronica del ^{40}Ca sono riportate di seguito.

Fit A:

$$f(x) = \frac{c_0 \left(1 + c_1 \frac{x^2}{c_2^2}\right)}{1 + \exp \frac{x-c_3}{c_4}} + \frac{c_5 \left(1 + c_6 \frac{x^2}{c_7^2}\right)}{1 + \exp \frac{x-c_8}{c_9}} + \frac{c_{10} \left(1 + c_{11} \frac{x^2}{c_{12}^2}\right)}{1 + \exp \frac{x-c_{13}}{c_{14}}} \quad (4.2.6)$$

con coefficienti

$$\begin{array}{ccccc} c_0 = -0.2149 & c_1 = 0.9624 & c_2 = 0.2369 & c_3 = 3.669 & c_4 = 0.3415 \\ c_5 = 0.02624 & c_6 = -0.6874 & c_7 = 0.8276 & c_8 = 1.395 & c_9 = 0.3264 \\ c_{10} = 0.3217 & c_{11} = 0.5122 & c_{12} = 0.2115 & c_{13} = 3.669 & c_{14} = 0.3416 \end{array}$$

Fit B:

$$f(x) = \frac{c_0 \left(1 + \frac{c_1 x^2}{c_2^2}\right)}{1 + \exp \frac{x-c_3}{c_4}} + \frac{c_5 \left(1 + \frac{c_6 x^2}{c_7^2}\right) + c_{10} \left(1 + \frac{c_{11} x^2}{c_{12}^2}\right)}{1 + \exp \frac{x-c_{13}}{c_{14}}} \quad (4.2.7)$$

con coefficienti

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

In **Figura 4.6** è ben visibile la differenza tra la densità ottenuta tramite il fit A (in azzurro) e il fit B (in blu). Come presentato nella sezione precedente, avendo variato l'utilizzo dei pesi nei fit abbiamo che scegliendoli della forma (4.2.5) i punti sulla coda della densità sono più liberi di allontanarsi dai dati iniziali. Inoltre è chiaramente visibile che da 5 fm in poi non è possibile far rientrare i punti del fit B entro 2 sigma dai valori reali della densità, di conseguenza bisogna ammettere di stare rappresentando una densità fisicamente differente rispetto alla densità Monte Carlo iniziale.

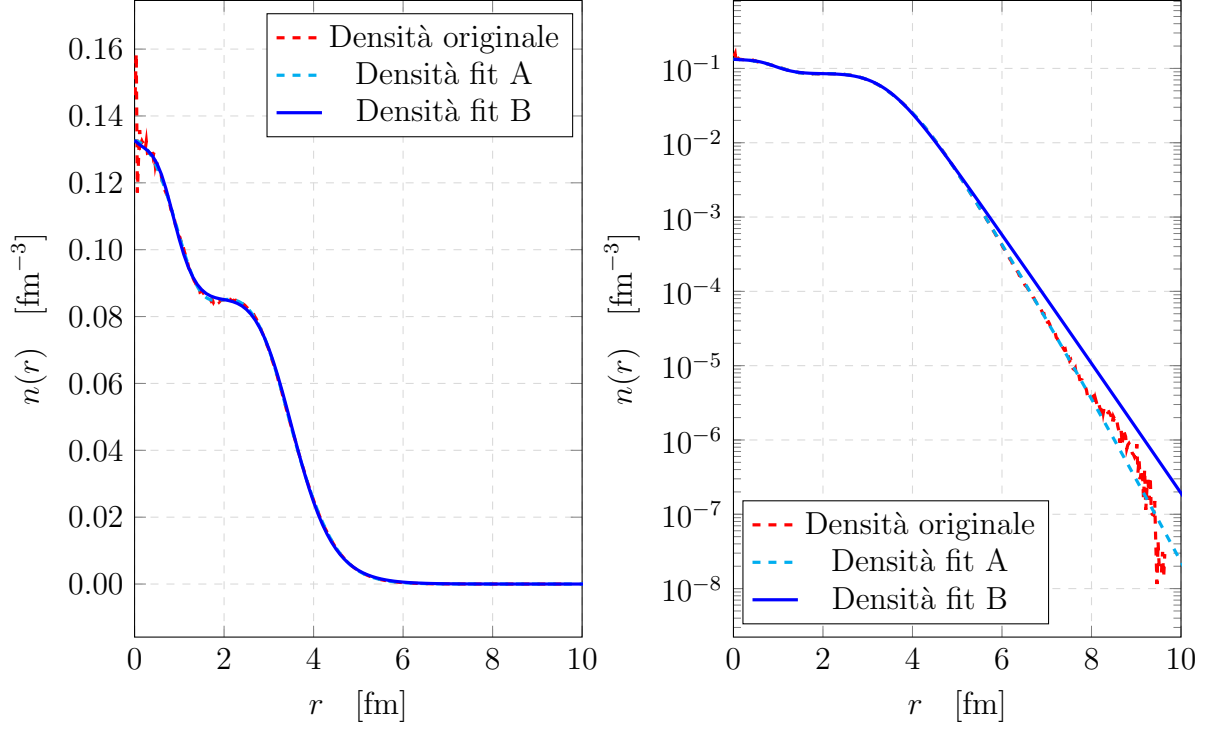


Figura 4.6: A sinistra: densità neutroni ^{40}Ca secondo i fit A e B presentati in Sez. 4.2.1. A destra: densità in scala logaritmica.

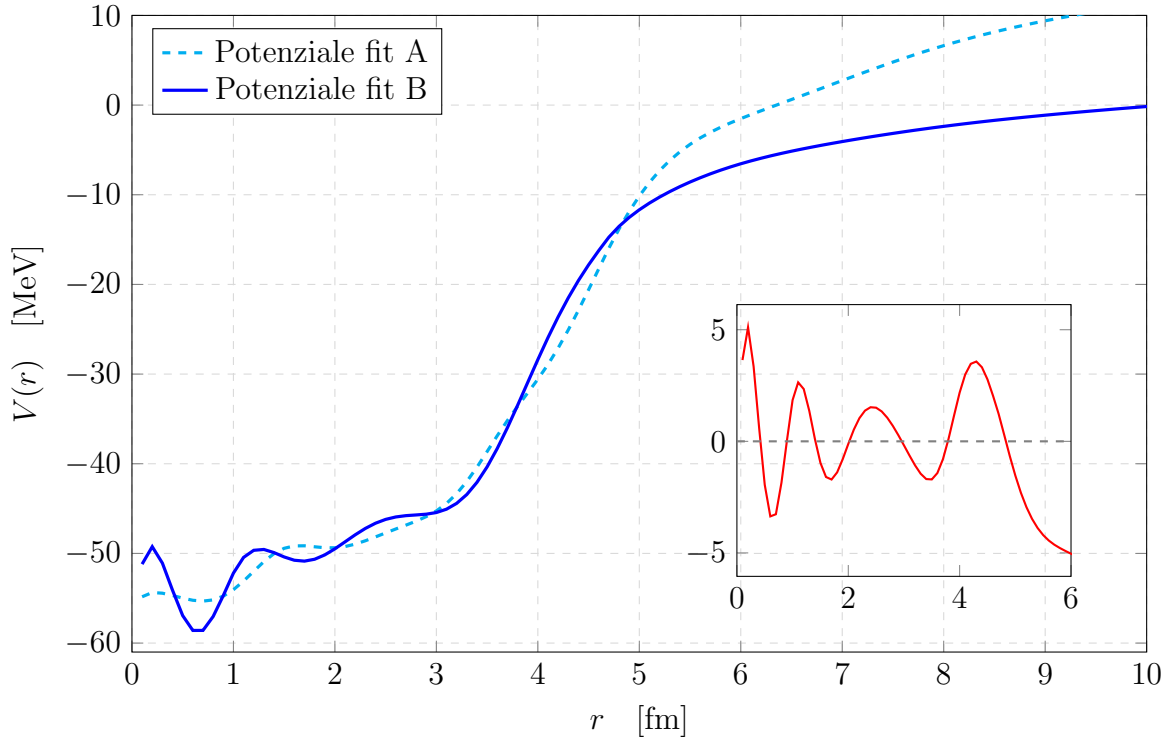


Figura 4.7: Potenziale di KS dei neutroni del ^{40}Ca ottenuto per i fit A e B. Lo scarto tra i due potenziali (linea rossa) nella regione entro 6 fm non supera i 5 MeV.

La **Figura 4.7** mostra i potenziali di Kohn-Sham risultati dall'inversione delle densità fittate. A partire da quanto ottenuto possiamo fare due considerazioni. La

prima concerne la regione interna del nucleo, come definita in Sez. 4.2, e consiste nell'osservare che i fit A e B portano alla stessa forma del potenziale efficace, a meno di qualche oscillazione. Se valutiamo infatti la differenza tra le curve nella regione che arriva fino a 5 fm otteniamo quanto mostrato nell'inset.

La seconda riguarda invece il comportamento dei potenziali all'esterno del nucleo, possiamo vedere che il potenziale relativo al fit A non risulta essere realistico, in quanto non tende a 0, condizione necessaria come discusso sopra. Al contrario il potenziale relativo al fit B mostra un buon andamento asintotico del potenziale che lo porta ad annullarsi come richiesto.

Vediamo quindi che, sebbene nel caso A siano state superate attraverso un fit con coda esponenziale le difficoltà relative alle anomalie presenti da 7 fm in poi nella densità Monte Carlo originaria, come mostrato in **Figura 4.2**, vediamo che questo non è sufficiente per ottenere il corretto potenziale efficace nella regione esterna del nucleo. Poiché il fit B riesce invece a realizzare una densità che dia tramite inversione un potenziale efficace accettabile, diventa rilevante il messaggio veicolato dalla **Figura 4.6**, ossia che per ottenere a partire dalla densità Monte Carlo un andamento corretto del potenziale è necessario allontanarsi fisicamente dalla densità di partenza.

ZIRCONIO 90 Riportiamo ora le stesse considerazioni fatte per i neutroni del ^{40}Ca ai neutroni dello ^{90}Zr . Le forme funzionali utilizzate per fittare le densità sono le seguenti:

Fit A:

$$f(x) = a \cdot \exp \left[- \left(\frac{x-b}{d} \right)^2 \right] + \frac{c_0 \left(1 + |c_1| \frac{x^2}{c_2^2} \right)}{1 + \exp \frac{x-c_3}{c_4}} + \frac{c_5 \left(1 + |c_6| \frac{x^2}{c_7^2} \right)}{1 + \exp \frac{x-c_8}{c_9}} \quad (4.2.8)$$

con coefficienti

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

Fit B:

$$\rho(x) = a \cdot \exp \left[- \left(\frac{x-b}{d} \right)^2 \right] + \frac{c_0 \left(1 + \frac{c_1 x^2}{c_2^2} \right)}{1 + \exp \frac{x-c_3}{c_4}} \quad (4.2.9)$$

con coefficienti

$$\begin{array}{ccccc} c_0 = 2.604 \cdot 10^{-5} & c_1 = 0.1835 & c_2 = 0.02741 & c_3 = 4.32 & c_4 = 0.4936 \\ a = 0.09872 & b = 0.677 & d = 2.484 & & \end{array}$$

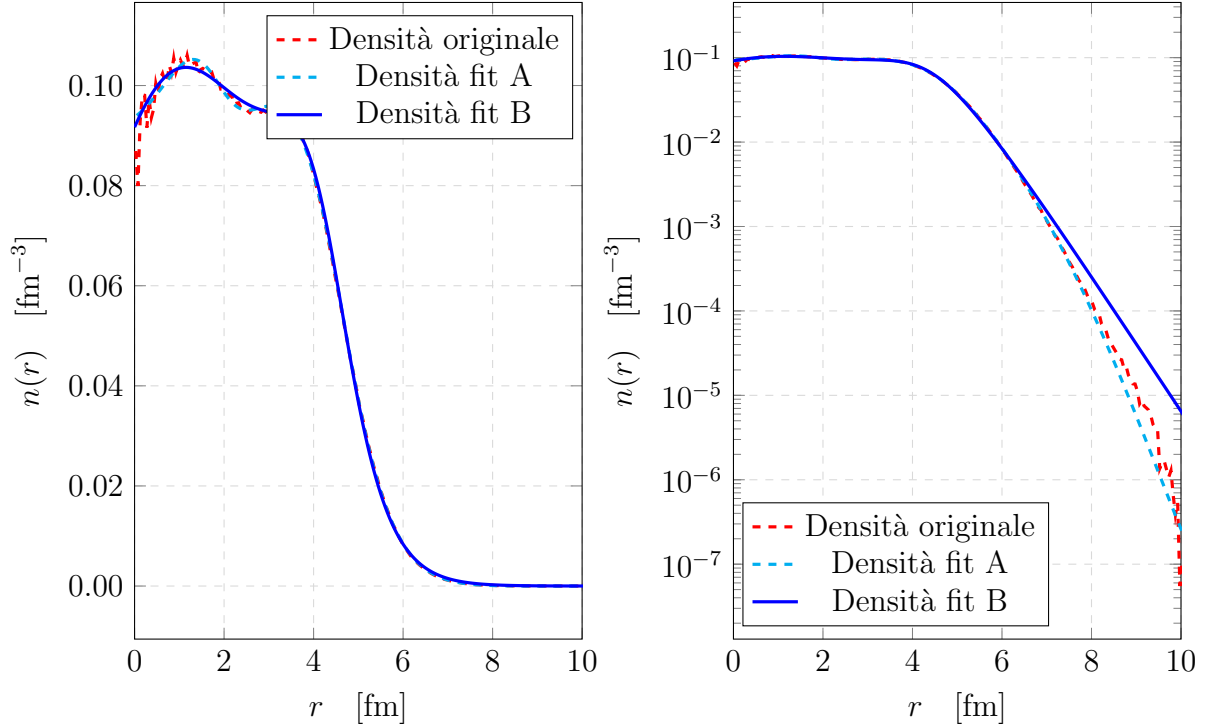


Figura 4.8: A sinistra: densità neutroni ^{90}Zr per i fit A e B. A destra: come a sinistra ma in scala logaritmica.

In **Figura 4.8** è riportato l'esito dei fit A e B applicati alla densità neutronica Monte Carlo del ^{90}Zr . Quello che possiamo osservare è che analogamente al caso del ^{40}Ca si ottiene una buona riproduzione della densità neutronica all'interno del nucleo e i due fit si diversificano nel comportamento sulla coda. Il fit A segue con accuratezza i punti della densità Monte Carlo mentre il fit B se ne discosta all'altezza di 6 fm.

Di conseguenza possiamo vedere in **Figura 4.9** che i potenziali efficaci ottenuti ricalcano quanto osservato per il ^{40}Ca , con un comportamento simile all'interno del nucleo e un andamento asintotico che ha successo solo nel caso del fit B.

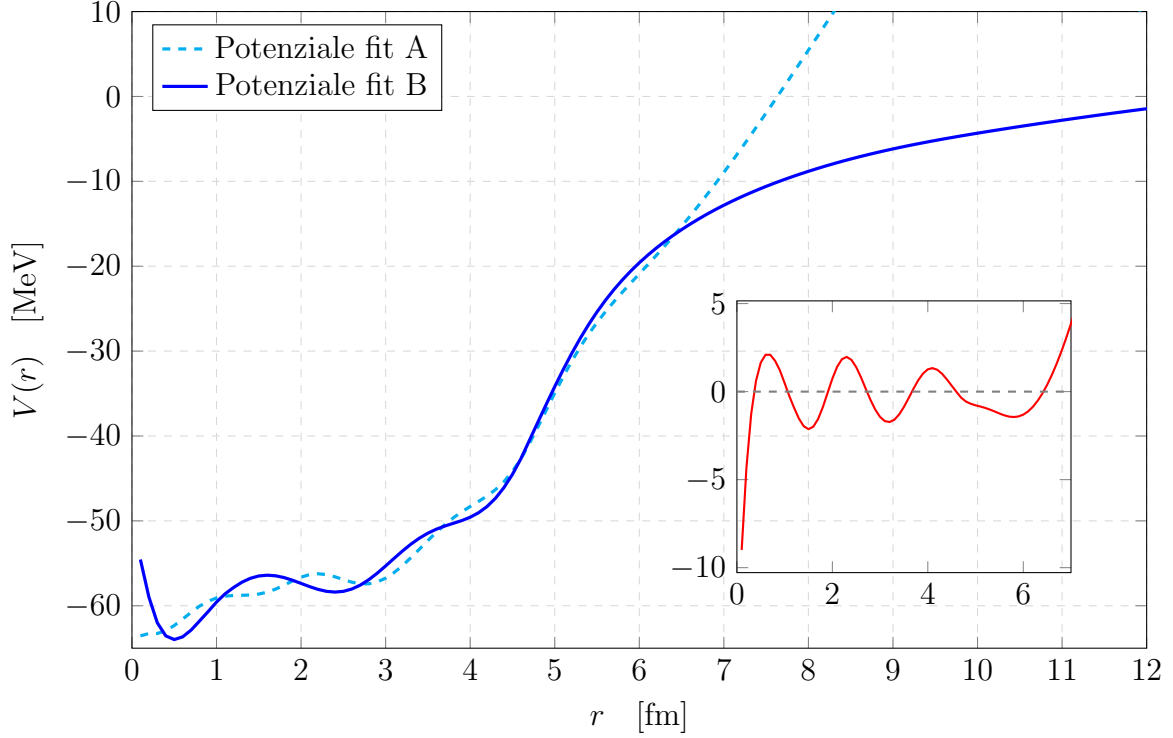


Figura 4.9: Potenziale di KS dei neutroni del ^{90}Zr ottenuto per i fit A e B. Lo scarto tra i due potenziali (linea rossa) nella regione entro i 7 fm supera i 5 MeV solo nel primo punto a 0.1 fm.

4.3 Self Consistent Green Functions - NNLOsat

La seconda classe di potenziali nucleari efficaci che sono stati studiati deriva dall'inversione di densità ottenute con calcoli *ab initio* basati sulla risoluzione dell'equazione di Schrödinger del sistema nucleare tramite il metodo delle funzioni di Green (Self Consistent Green Functions methods, SCGF) implementando l'interazione nucleare NNLOsat.

In [Som+20] viene verificata la capacità predittiva di tale metodo many-body applicato a nuclei leggeri e di massa media, confrontando i risultati ottenuti calcolando osservabili come l'energia di legame totale, di ground-state, di separazione e il raggio di carica con i valori sperimentali. Per quanto riguarda una stima dell'accuratezza del metodo *ab initio* si può vedere in [Som+20, Figura 7] che sono riportate le energie di legame totale per gli isotopi dell'Ossigeno, mostrando un buon accordo con i dati sperimentali, stimando gli errori computazionali dovuti alla limitatezza dello spazio modello come l'1% del valore dell'energia di legame totale. In [Dug+16] sono presentati i risultati dei calcoli *ab initio* con l'interazione NNLOsat per alcuni isotopi del Silicio. Un esempio indicativo è l'ottima riproduzione del raggio di carica del ^{36}Si ottenendo un valore di 3.291 fm, rispetto al valore sperimentale di 3.2985 ± 0.0024 fm.

4.3.1 Dalle densità ai potenziali: grafici

Riportiamo ora i risultati ottenuti tramite inversione delle equazioni di Kohn-Sham per le densità ottenute da calcoli *ab initio* SCGF-NNLOsat. A differenza delle densità

Monte Carlo in questo caso non è stato necessario effettuare fit o smoothing delle densità originali.

Ossigeno 16 e Calcio 40 Il caso dei nuclei del ^{16}O e del ^{40}Ca è esemplare per mostrare gli effetti del potenziale coulombiano sul potenziale efficace di KS. Essi sono infatti nuclei con un numero identico di protoni e neutroni.

In **Figura 4.10** sono riportate le densità NNLOsat e i potenziali di Kohn-Sham ottenuti per l'Ossigeno 16. La prima considerazione è che il potenziale di KS ricavato riproduce in maniera realistica il potenziale efficace nucleare atteso. Esso infatti consiste in una buca di potenziale ben definita seppur molto ripida a causa della piccola distanza della regione superficiale, ben visibile tra 2 e 4 fm (il raggio sperimentale è stimato tramite la formula $R = r_0 A^{1/3} = 3.2$ fm), dal centro del nucleo. Inoltre asintoticamente, a meno di oscillazioni di pochi fm, il potenziale tende a zero, completando il profilo adeguato a descrivere un potenziale efficace associato ad un'interazione a breve range. Anche in questo caso, come discusso per le densità Monte Carlo in Sez. 4.2, è stato necessario traslare verticalmente i potenziali, ed è stato fatto imponendo che i potenziali neutronici fossero nulli per $r = 12$ fm, come verrà ripreso in Sez. 4.4.1.

Le stesse considerazioni si adattano al caso del ^{40}Ca , le cui densità NNLOsat e i relativi potenziali di Kohn-Sham sono mostrati in **Figura 4.11**.

È anche possibile osservare la corretta riproduzione della barriera coulombiana nel caso dei protoni dell'Ossigeno 16 e del Calcio 40, costituito dal picco sul bordo della buca. Per verificarlo in maniera qualitativa è stato riportato sia in **Figura 4.10** che in **Figura 4.11** anche il potenziale coulombiano (linea tratteggiata marrone), calcolato secondo la formula (3.1.4), in modo da rendere visibile il fatto che la barriera che appare nel potenziale protonico derivi dal contributo coulombiano al potenziale nucleare efficace.

Altri nuclei Per i nuclei con diverso numero di protoni e neutroni i grafici relativi a densità e potenziali sono presentati in figure separate. Nelle **Figure 4.12-4.19** sono esposti i risultati per i nuclei ^{24}O , ^{34}Si , ^{48}Ca e ^{54}Ca . Va sottolineato che per tutti questi nuclei l'inversione di Kohn-Sham delle densità NNLOsat avviene con successo per quanto riguarda il profilo ottenuto dei potenziali efficaci.

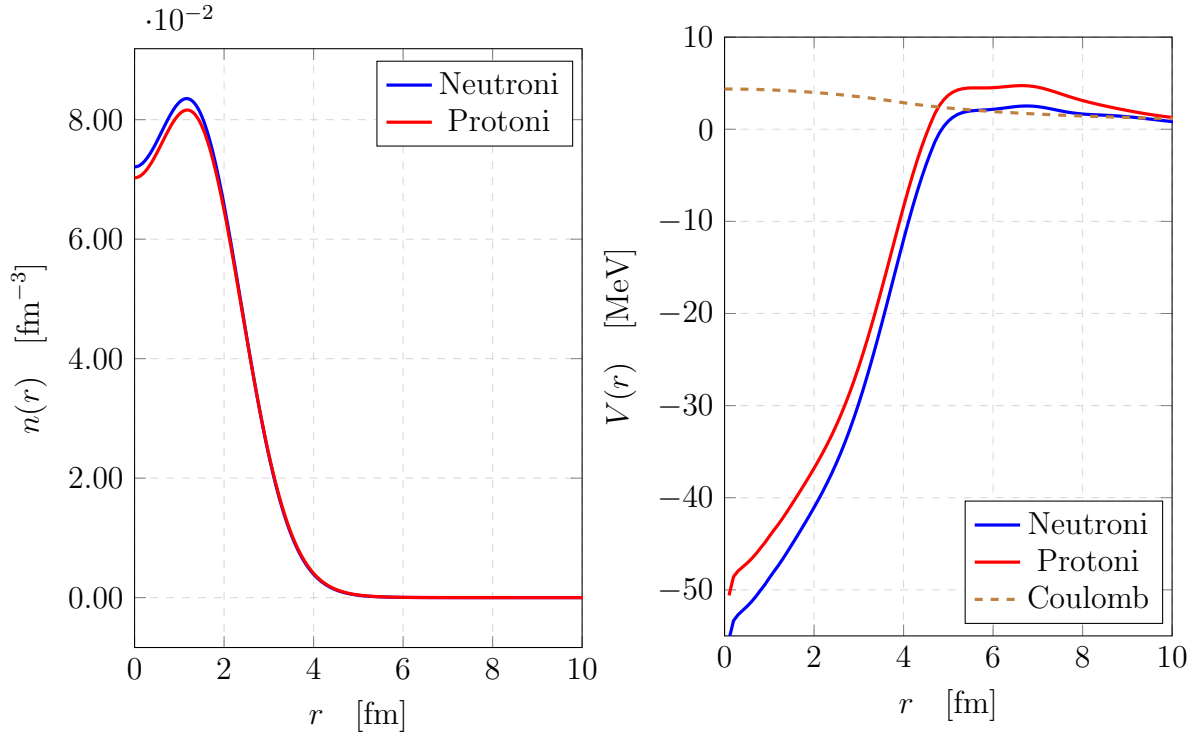


Figura 4.10: A sinistra: densità neutronica (in blu) e protonica (rossa) ^{16}O . A destra: potenziali KS ottenuti e potenziale coulombiano presente nel caso dei protoni (linea marrone tratteggiata).

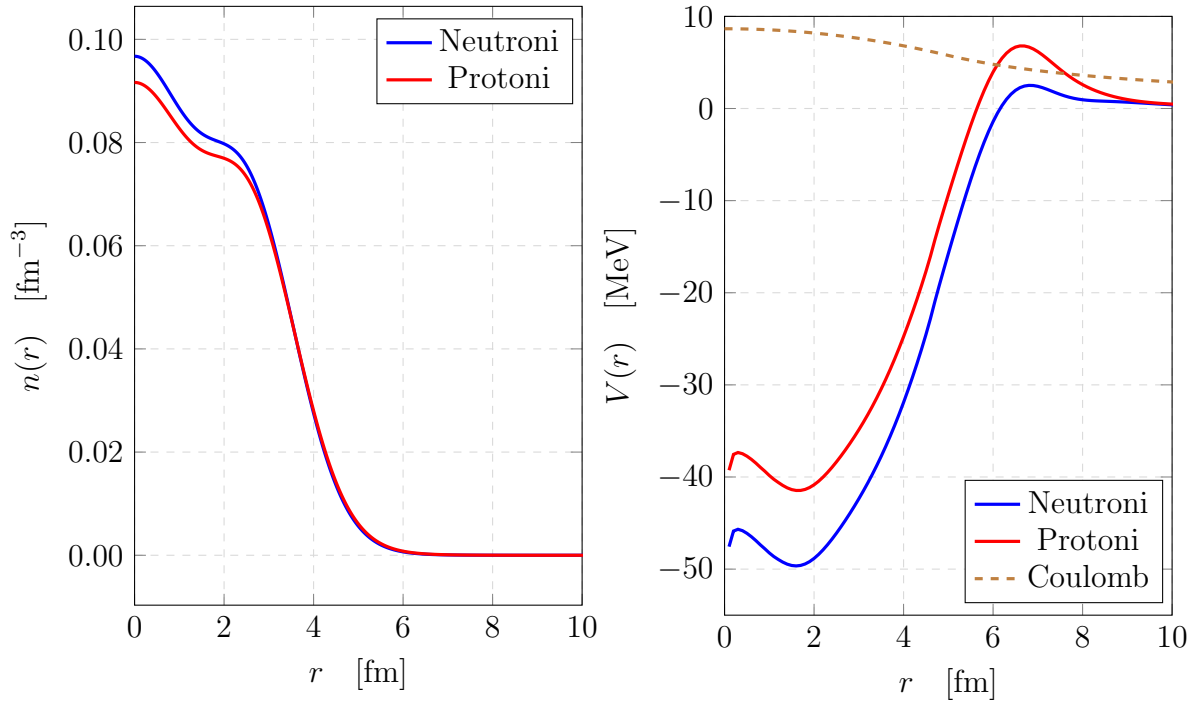


Figura 4.11: A sinistra: densità neutronica (in blu) e protonica (rossa) del ^{40}Ca . A destra: potenziali KS ottenuti e potenziale coulombiano presente nel caso dei protoni (linea marrone tratteggiata).

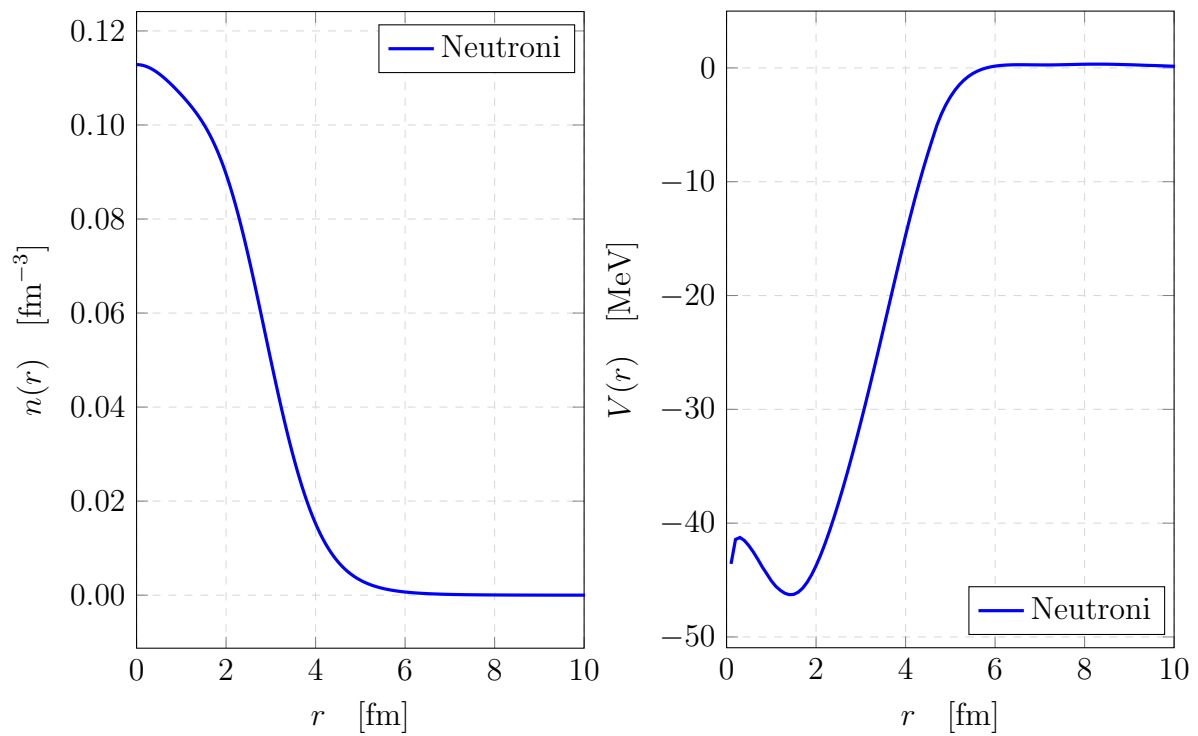


Figura 4.12: A sinistra: densità neutronica ^{24}O . A destra: potenziale KS ottenuto.

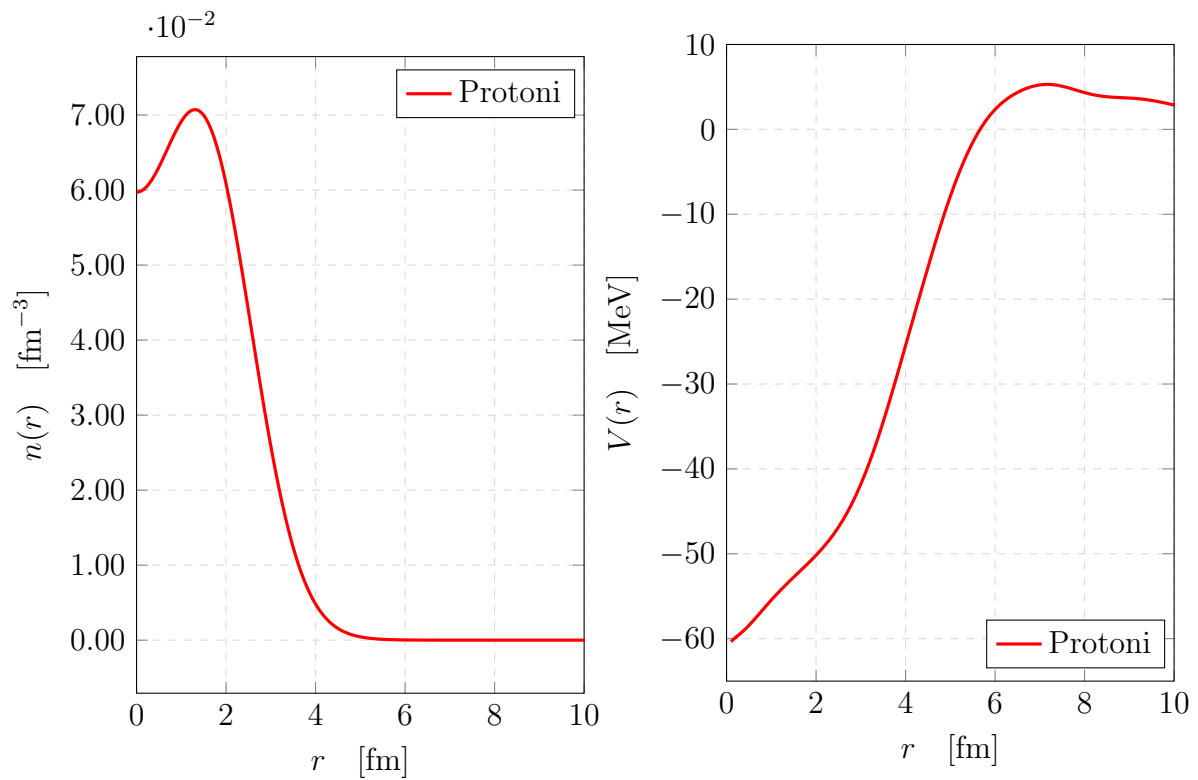


Figura 4.13: A sinistra: densità protonica ^{24}O . A destra: potenziale KS ottenuto.

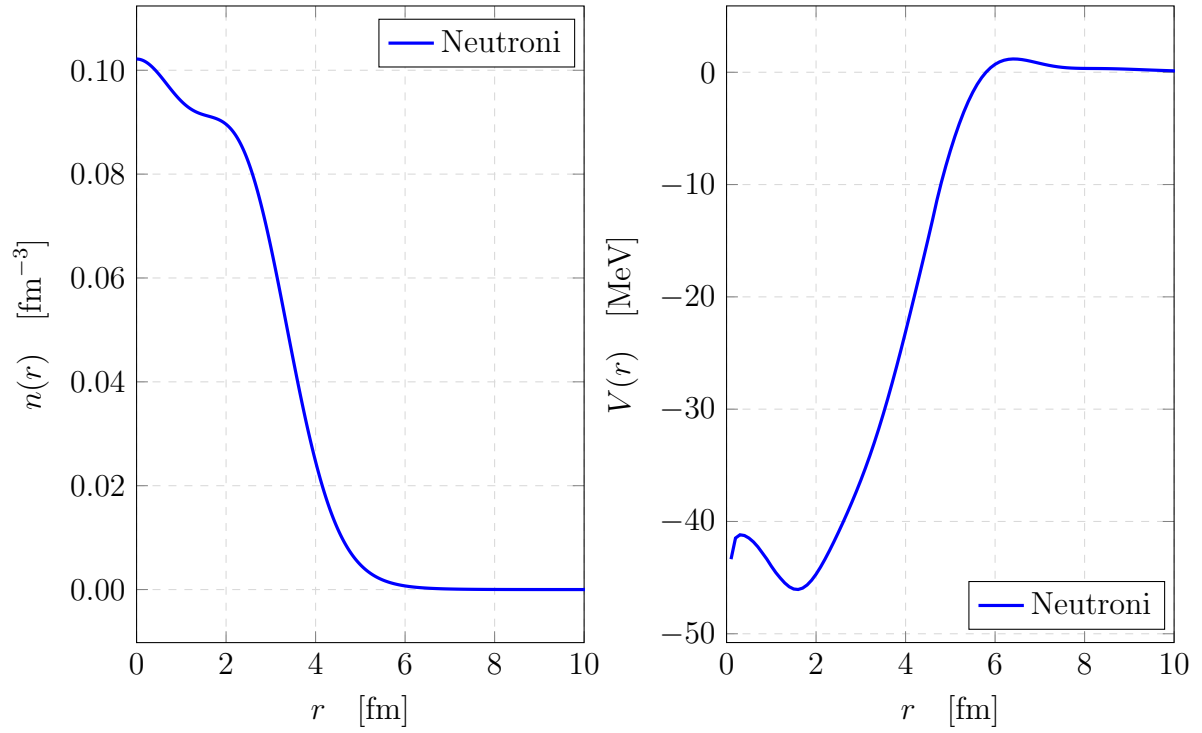


Figura 4.14: A sinistra: densità neutronica ^{34}Si . A destra: potenziale KS ottenuto.

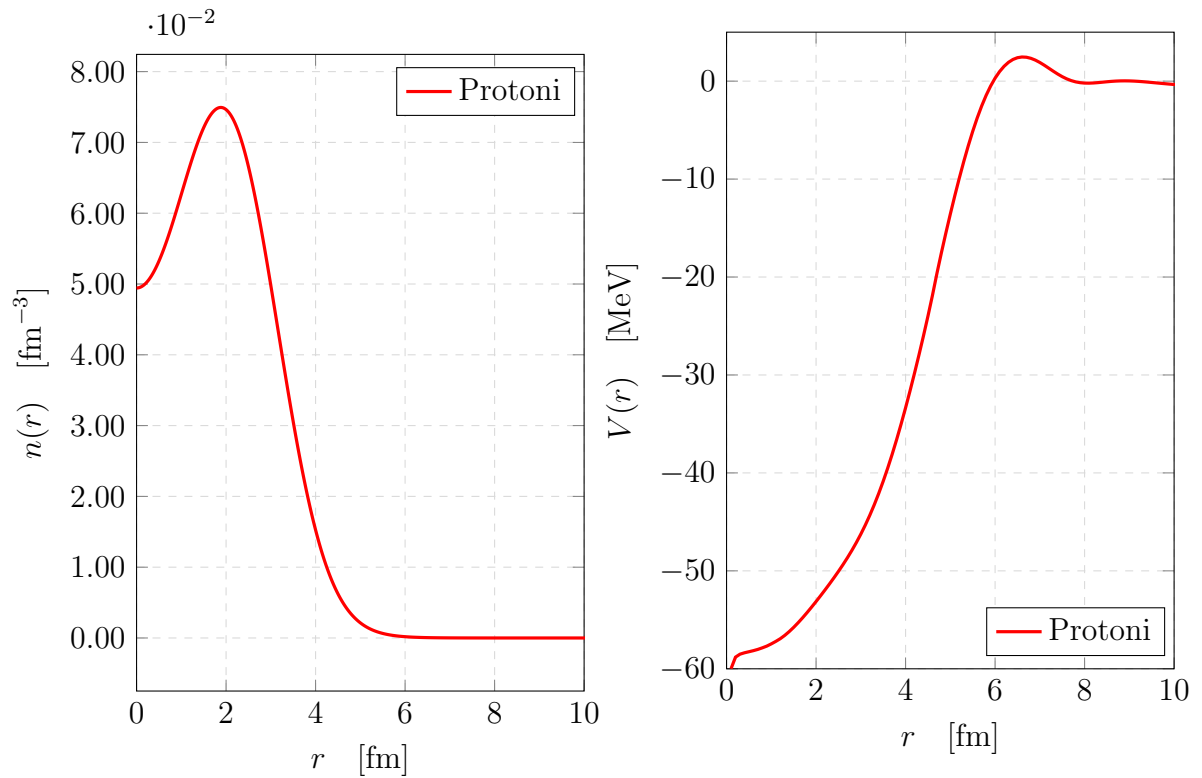


Figura 4.15: A sinistra: densità protonica ^{34}Si . A destra: potenziale KS ottenuto.

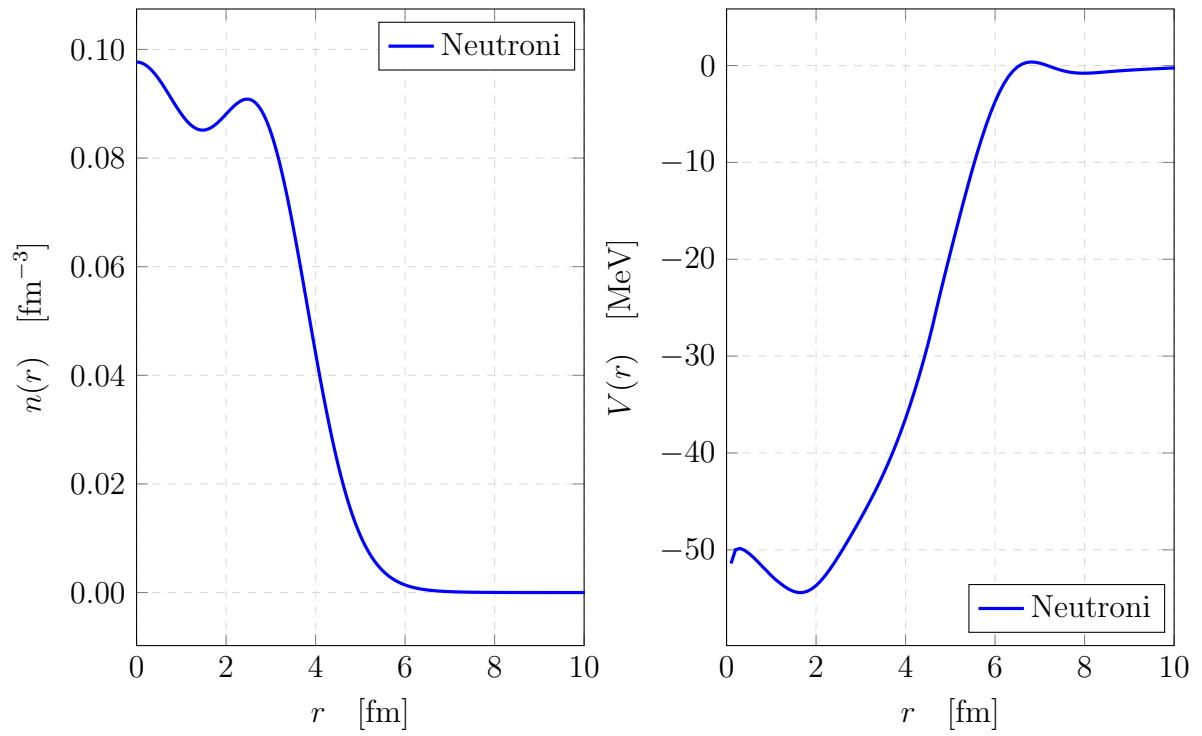


Figura 4.16: A sinistra: densità neutronica ^{48}Ca . A destra: potenziale KS ottenuto.

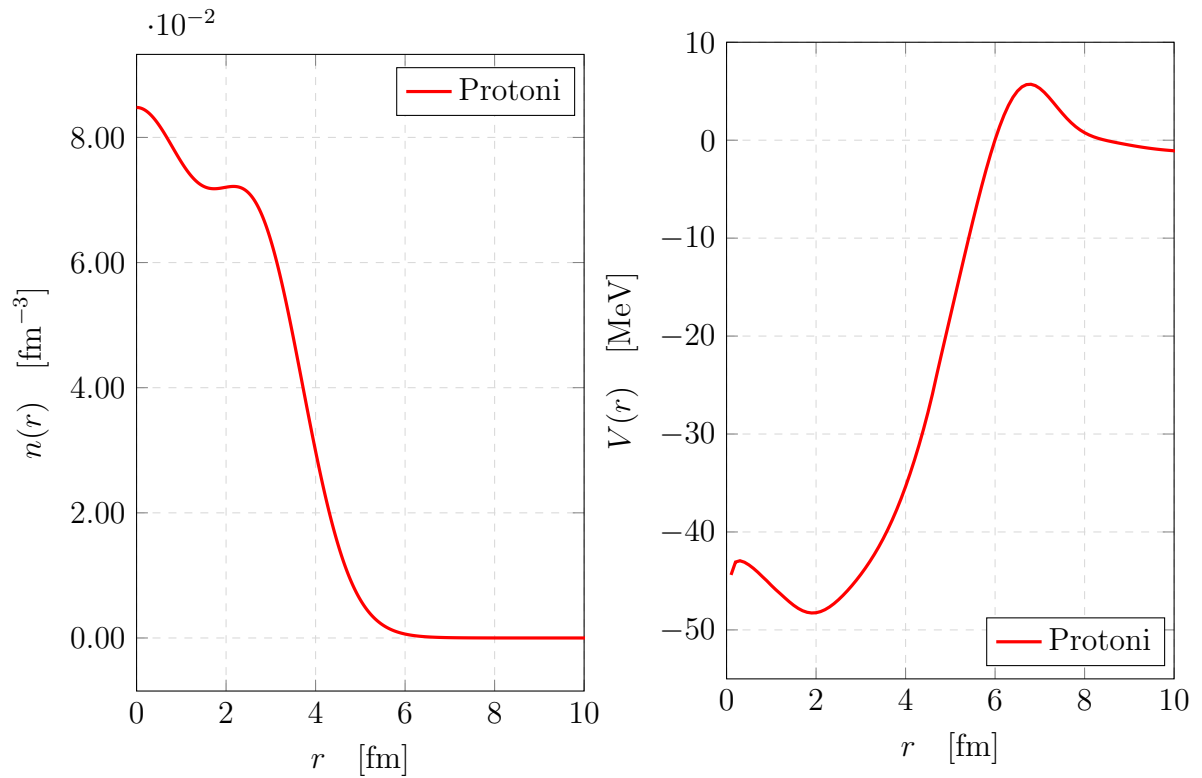


Figura 4.17: A sinistra: densità protonica ^{48}Ca . A destra: potenziale KS ottenuto.

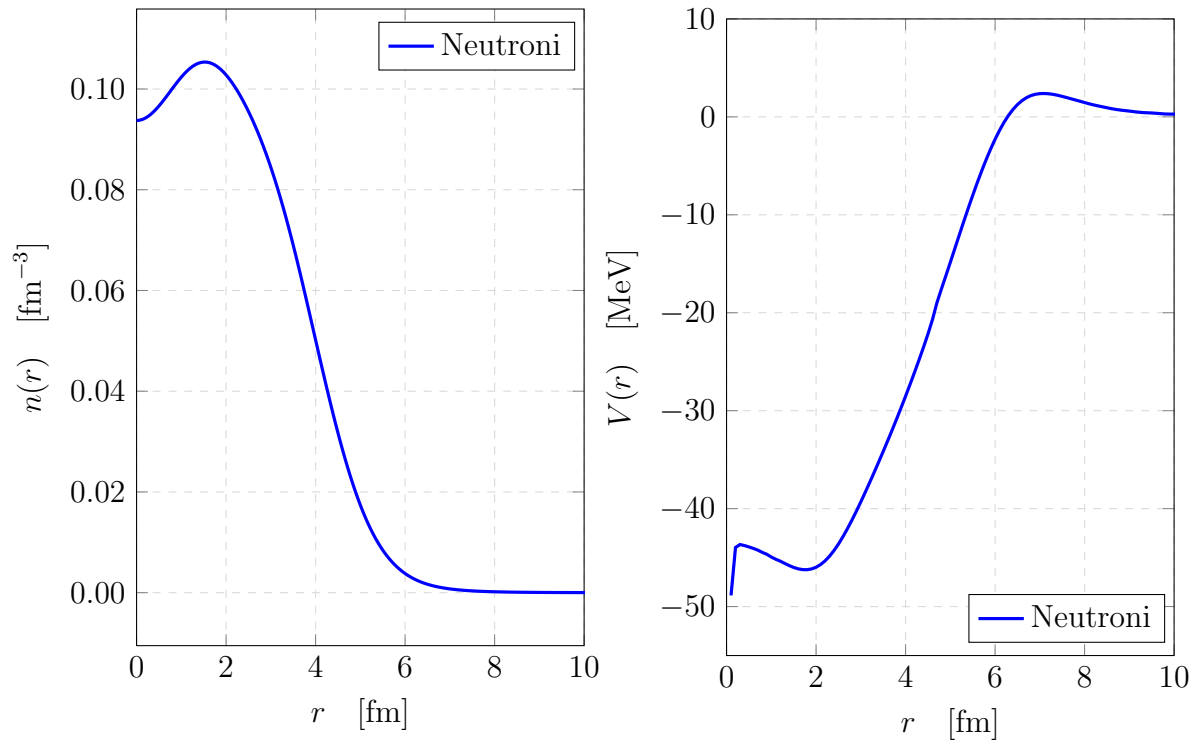


Figura 4.18: A sinistra: densità neutronica ^{54}Ca . A destra: potenziale KS ottenuto.

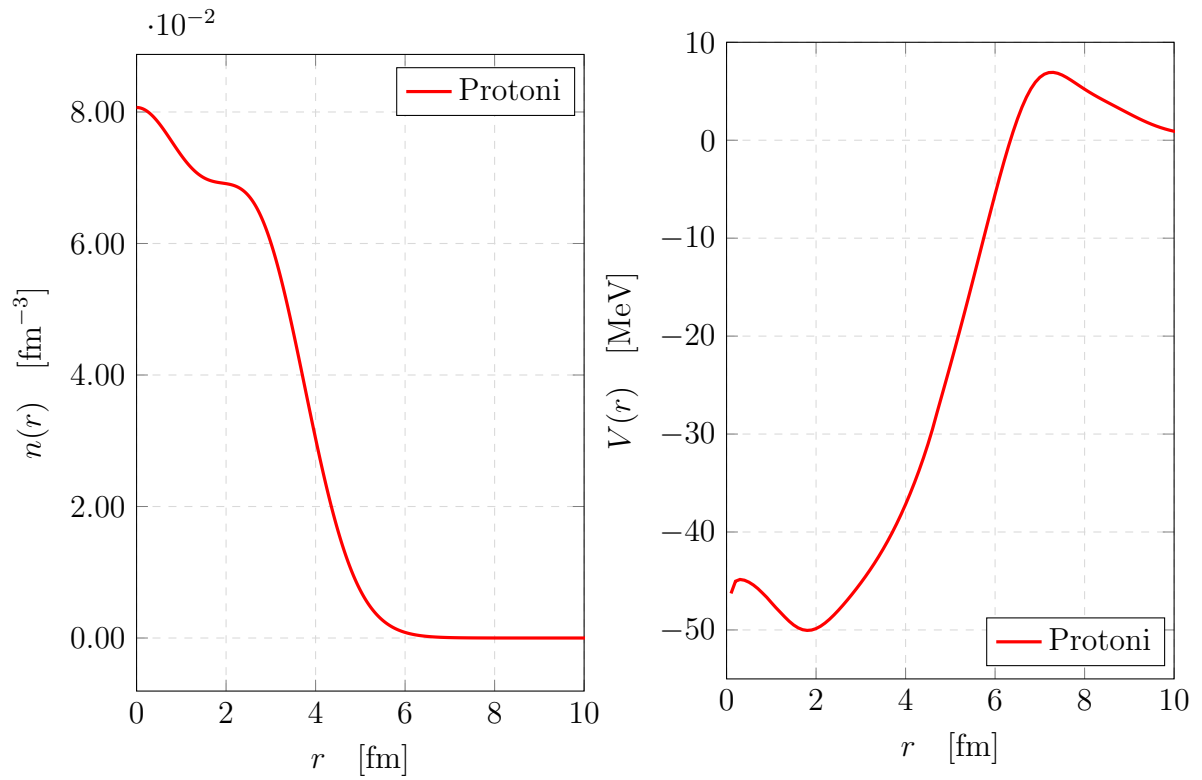


Figura 4.19: A sinistra: densità protonica ^{54}Ca . A destra: potenziale KS ottenuto.

4.4 Calcolo dell'energia

4.4.1 Autovalori degli orbitali di Kohn-Sham

Riportiamo ora gli autovalori ottenuti tramite la risoluzione dell'equazione di Kohn-Sham con l'algoritmo di shooting. Essendo il potenziale di Kohn-Sham, e di conseguenza anche il set di autovalori calcolati nella risoluzione del problema diretto, determinato a meno di una costante additiva, è necessario definire un'energia di riferimento. È ragionevole scegliere per tale energia il valore a cui tende asintoticamente il potenziale per r grandi, in quanto è noto che un'interazione a breve range debba andare a 0. Si è quindi scelto di traslare i potenziali neutronici e protonici e i relativi autovalori della quantità necessaria per portare a zero il potenziale neutronico nel punto a 12 fm.

Nella colonna di sinistra sono riportati gli autovalori relativi alle densità neutroniche mentre in quella di sinistra quelli relativi alle densità protoniche. Le linee tratteggiate corrispondono a sub-shell, ossia orbitali con stessi numeri quantici n , l e j .

$1p$		-16.212	$1p$		-11.618
$1s$		-30.134	$1s$		-25.325

Figura 4.20: Autovalori ^{16}O [MeV]

$2s$		-4.421	$1p$		-26.829
$1d_{\frac{5}{2}}$		-4.894	$1s$		-39.255
$1p$		-17.951			
$1s$		-30.557			

Figura 4.21: Autovalori ^{24}O [MeV]

$2s$		-8.614	$1d_{\frac{5}{2}}$		-19.361
$1d_{\frac{5}{2}}$		-9.960	$1p$		-31.173
$1p$		-21.622	$1s$		-42.551
$1s$		-32.436			

Figura 4.22: Autovalori ^{34}Si [MeV]

$2s$		-15.251	$2s$		-7.946
$1d$		-16.779	$1d$		-9.504
$1p$		-27.579	$1p$		-20.035
$1s$		-37.485	$1s$		-29.654

Figura 4.23: Autovalori ^{40}Ca [MeV]

$1f_{7/2}$	-9.889	$2s$	-16.221
$2s$	-19.513	$1d$	-18.894
$1d$	-21.151	$1p$	-28.989
$1p$	-32.077	$1s$	-37.708
$1s$	-42.054		

Figura 4.24: Autovalori ^{48}Ca [MeV]

$2p$	-3.232	$2s$	-18.708
$1f_{7/2}$	-3.252	$1d$	-20.762
$2s$	-12.608	$1p$	-30.541
$1d$	-13.962	$1s$	-39.205
$1p$	-24.625		
$1s$	-34.465		

Figura 4.25: Autovalori ^{54}Ca [MeV]

4.4.2 Energia di separazione

Nell'ambiente della teoria di Hartree-Fock vale il teorema di Koopmans il quale afferma che il più alto autovalore tra quelli degli stati occupati ottenuto dalle equazioni di Schrödinger di singola particella, coincide con l'opposto dell'energia di ionizzazione, nel caso di un sistema elettronico. Nel caso della DFT è stato dimostrato che vale un risultato analogo applicato agli autovalori relativi agli orbitali di Kohn-Sham [PL97].

Possiamo quindi sfruttarlo per determinare le energie di separazione dei nuclei a partire dai risultati ottenuti dall'inversione delle densità NNLOsat.

In **Tabella 4.1** è stato riportato il confronto tra i valori delle energie di separazione sperimentali, ottenute tramite le relazioni

$$\begin{aligned} S_n &= m(A-1, Z) + m_n - m(A, Z) \\ S_p &= m(A-1, Z-1) + m_p - m(A, Z) \end{aligned} \quad (4.4.1)$$

quelle ottenute dall'inversione delle densità *ab initio* e quelle ottenute direttamente dai calcoli *ab initio*. Le masse atomiche utilizzate nelle relazioni (4.4.1) sono state prese da [Lab15].

Dai valori riportati troviamo che la massima differenza tra le energie di separazione relative alle tre diverse fonti è presente per il ^{54}Ca , dove l'energia di separazione del calcolo *ab initio* dista 2.154 MeV dal valore sperimentale. La differenza tra il valore calcolato *ab initio* e il valore sperimentale è da attribuirsi agli errori computazionali nel metodo utilizzato. Per quanto riguarda le energie di separazione dall'IKS ricordiamo che sono state ottenute tramite l'opposto dell'ultimo autovalore degli orbitali di Kohn-Sham, dopo aver traslato il potenziale della quantità necessaria per renderlo nullo a 12 fm. Idealmente i valori ottenuti dall'*ab initio* e dall'IKS dovrebbero essere uguali, tuttavia nel passaggio di traslazione del potenziale entra un'errore causato dall'andamento non perfettamente costante del potenziale di Kohn-Sham. È stato infatti ragionevolmente scelto come punto di riferimento $r = 12$ fm, tuttavia questo non significa che il potenziale prima e dopo tale punto sia costante. Di conseguenza un'oscillazione nell'andamento del potenziale in quel punto causa un'errore nel valore dell'energia di separazione. Si ipotizza che tale errore abbia origine numerica all'interno dell'algoritmo di inversione vLB. Una sua stima è data dal range di scarto

		Sperimentale [MeV]	<i>ab initio</i> [MeV]	IKS [MeV]
¹⁶ O	n	15.673	14.333	16.212
	p	11.618	11.129	11.618
²⁴ O	n	4.248	3.977	4.421
	p	26.656	25.884	26.829
³⁴ Si	n	7.522	7.908	8.614
	p	18.268	17.890	19.361
⁴⁰ Ca	n	15.634	14.039	15.251
	p	8.328	7.202	7.946
⁴⁸ Ca	n	8.961	9.427	9.889
	p	15.293	14.528	16.221
⁵⁴ Ca	n	4.401	2.247	3.232
	p	19.877	18.506	18.708

Tabella 4.1: Confronto tra le energie di separazione neutroniche e protoniche sperimentali, *ab initio* e quelle ottenute dall'inversione di Kohn-Sham delle densità *ab initio*. Si fa riferimento alle densità ottenute da SCGF con interazione NNLOsat.

minimo-massimo 0.202 – 1.879 MeV osservato tra i valori della seconda e della terza colonna della **Tabella 4.1**.

4.4.3 Energia totale

Calcoliamo ora l'energia totale dei nuclei. Il funzionale densità, dopo la trattazione dei teoremi di Hohenberg e Kohn e dello schema di Kohn-Sham, sappiamo che può essere esplicitato nella forma

$$E_{\{V_{ext}\}}[\rho_0] = \sum_{i=1}^N \int \phi_i^*(\mathbf{r}) \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_i(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int v_H(\mathbf{r}) \rho_0(\mathbf{r}) d^3r + \int V_{ext}(\mathbf{r}) \rho_0(\mathbf{r}) d^3r + E_{xc}[\rho] \quad (4.4.2)$$

considerando un sistema elettronico di densità di ground-state ρ_0 con potenziale esterno V_{ext} , potenziale di Hartree v_H ed energia di scambio e correlazione E_{xc} , dove le ϕ_i sono gli orbitali di Kohn-Sham.

Confrontando l'equazione (4.4.2) con il valore di aspettazione dell'hamiltoniana di singola particella di Kohn-Sham (2.3.7) nel ground-state otteniamo

$$E_{tot} = \sum_i^N \lambda_i + E_{xc}[\rho] - \int \rho_0(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{2} v_H(\mathbf{r}) + v_{xc}(\mathbf{r}) \right] d^3r \quad (4.4.3)$$

dove i λ_i sono gli autovalori associati agli orbitali di Kohn-Sham e v_{XC} è il potenziale di scambio e correlazione, definito secondo (2.3.7).

Nel caso nucleare l'espressione (4.4.3) può essere modificata ipotizzando che il potenziale di Kohn-Sham, il quale raccoglie sia i contributi di scambio e correlazione che i termini di interazione elettrostatica, possa essere sostituito direttamente all'interno del secondo addendo trattandolo come un potenziale di Hartree efficace, permettendo

di arrivare all'espressione

$$E_{tot} = \sum_i^N \lambda_i - \frac{1}{2} \int \rho_0(\mathbf{r}) v_{KS}(\mathbf{r}) d^3r \quad (4.4.4)$$

É chiaro che il passaggio effettuato da (4.4.3) a (4.4.4) corrisponde ad una semplificazione del problema, tuttavia è utile riportare ugualmente i valori ottenuti con lo scopo di mostrare quanto al momento si è distanti da una riproduzione accettabile dell'energia di legame totale. Riportiamo quindi nella **Tabella 4.2** i valori ottenuti per l'energia totale dai potenziali efficaci di KS ricavati dalle densità *ab initio* NNLOsat, confrontati con i valori calcolati *ab initio* e i valori sperimentali, presi da [Hig].

	Sperim. [MeV]	<i>ab initio</i> [MeV]	IKS [MeV]
¹⁶ O	-127.621	-126.294	-176.135
²⁴ O		-171.497	-232.285
³⁴ Si	-283.434	-282.938	-466.786
⁴⁰ Ca	-342.056	-336.459	-517.335
⁴⁸ Ca	-415.996		-730.791
⁵⁴ Ca	-444.191	-438.964	-722.776

Tabella 4.2: Confronto tra le energie totali sperimentali, quelle ottenute direttamente dai calcoli *ab initio* e quelle calcolate tramite l'equazione (4.4.4).

I risultati ottenuti mostrano come atteso una significativa differenza sia dai valori sperimentali che dai valori calcolati *ab initio* delle energie di legame totali. Troviamo quindi conferma del fatto che considerare tutti i contributi di scambio e correlazione all'interno di un unico potenziale medio di Hartree non è sufficiente.

4.5 Confronto con il metodo CV

Si vuole ora confrontare l'esito dell'inversione di Kohn-Sham se realizzata tramite due metodi IKS differenti. Il metodo approfondito in questo lavoro è stato il metodo vLB il quale, come mostrato in Sez. 2.3, si basa su un algoritmo iterativo per la determinazione del potenziale efficace. Un metodo di inversione alternativo è il *Constrained Variational* (CV) [Acc+20], il quale affronta l'inversione delle equazioni di Kohn-Sham tramite la formulazione di un problema variazionale.

Abbiamo quindi la possibilità di confrontare i due metodi prendendo come esempio il caso dei neutroni del ⁴⁰Ca. Effettuiamo l'inversione delle densità ottenute dai due metodi *ab initio* considerati in questo capitolo, ossia il Diffusion Monte Carlo con l'interazione AV4' e il metodo delle Self-Consistent Green Function con l'interazione NNLOsat, confrontate in **Figura 4.26**. La densità Monte Carlo riportata in figura e utilizzata per effettuare l'inversione è la densità corrispondente al fit B della Sez. 4.2.1.

L'esito dell'inversione di Kohn-Sham delle quattro densità considerate è mostrato in **Figura 4.27**. Quello che possiamo osservare è che la differenza tra i potenziali data dalla scelta del metodo di inversione è qualitativamente insignificante rispetto alla differenza data dalla densità *ab initio* utilizzata. Il caso del ⁴⁰Ca è a titolo di esempio, ma lo stesso risultato è stato ottenuto anche per tutti gli altri nuclei presi in considerazione.

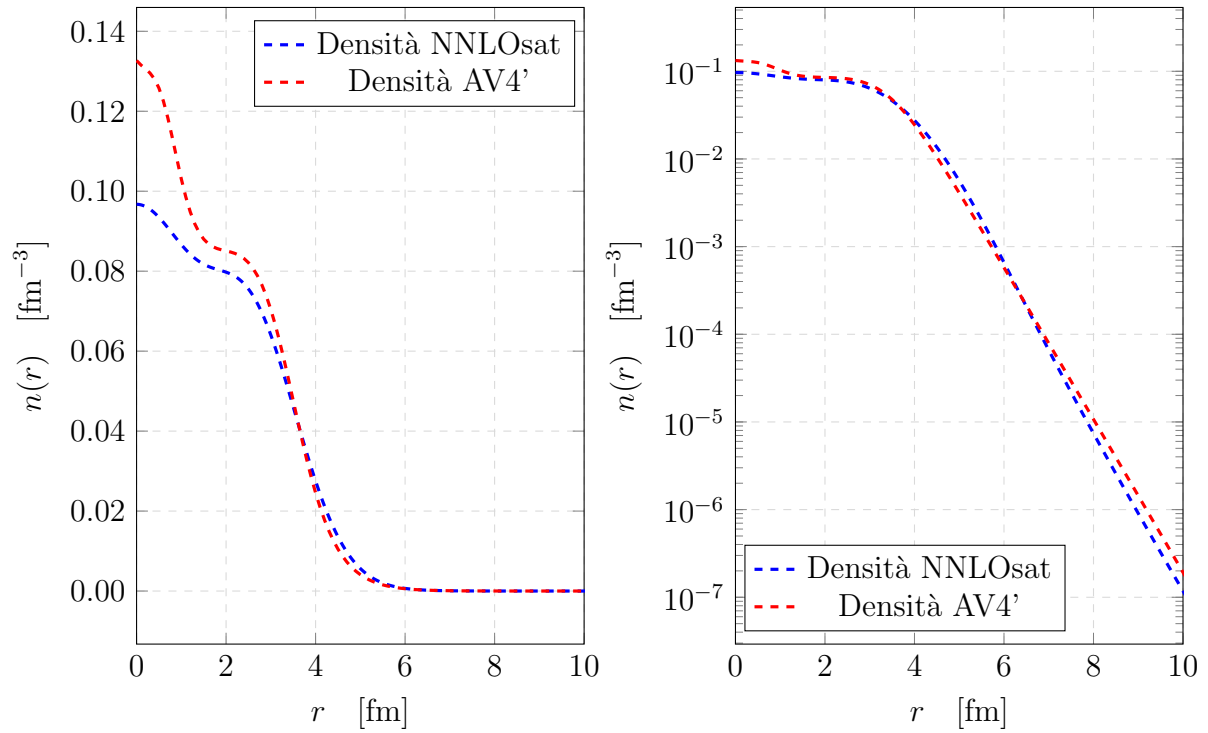


Figura 4.26: A sinistra: densità neutroniche del ^{40}Ca AV4' (fit) e NNLOsat. A destra: come a sinistra, in scala logaritmica.

Di conseguenza possiamo dedurre che l'errore intrinseco associato alla scelta del metodo di inversione, per quanto riguarda i metodi vLB e CV, è trascurabile rispetto all'errore associato alla scelta della densità *ab initio*.

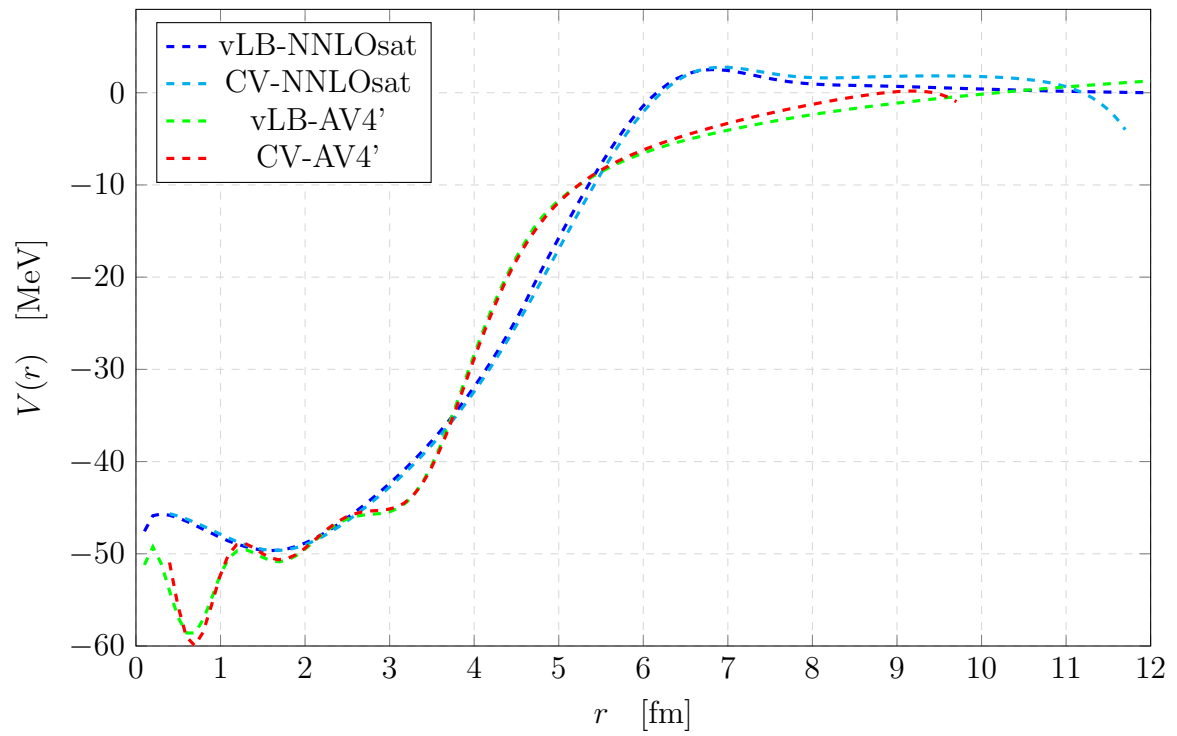


Figura 4.27: Potenziali di Kohn-Sham per i neutroni del ^{40}Ca , relativi a due metodi di inversione: vLB e Cv, e a due diverse densità *ab initio* : AV4' e NNLOsat.

Capitolo 5

Conclusioni

L'obiettivo prefissato per il lavoro era di risolvere il problema inverso di Kohn-Sham ricavando i potenziali efficaci nucleari a partire da densità ottenute con calcoli *ab initio*. Dopo aver percorso nella Sez. 4 i risultati ottenuti possiamo fare ora una sintesi di quanto osservato per le densità calcolate con i metodi *ab initio* di Diffusion Monte Carlo e Self-Consistent Green Functions e lasciare spazio a prospettive per lavori futuri.

Nel procedimento di IKS non è risultato immediato ottenere esiti positivi per le densità ottenute dai calcoli Monte Carlo con l'interazione AV4'. Una causa di complicazione è data dalla natura intrinsecamente statistica del metodo *ab initio* che impone alla densità un andamento irregolare. I potenziali nucleari efficaci ottenuti hanno richiesto un'attenta lavorazione delle densità di partenza in termini di fit, a causa della difficoltà nel trovare dopo l'inversione un andamento asintotico dei potenziali che fosse realistico. In letteratura [JW18] è infatti noto che piccole irregolarità nelle densità possono causare problemi considerevoli nell'algoritmo di inversione. A causa della difficoltà nel riprodurre l'andamento asintotico atteso per i potenziali efficaci si è deciso di cambiare i pesi nel fit in modo da valorizzare maggiormente la regione interna del nucleo.

L'approccio all'inversione delle densità SCGF con interazione NNLOsat è risultato realizzabile in modo più diretto rispetto a quanto potuto con le densità Monte Carlo. Un fattore sicuramente rilevante è che i calcoli delle SCGF sono eseguiti su una base di stati di oscillatore armonico, di conseguenza non soffrono delle oscillazioni statistiche caratteristiche delle densità Monte Carlo. È stato infatti possibile ottenere potenziali nucleari efficaci realistici sia per neutroni che per protoni senza la necessità di fittare i punti delle densità *ab initio*, permettendo inoltre lo studio delle proprietà di nuclei magici in un range che va dall' ^{16}O al ^{54}Ca .

Nel caso delle densità NNLOsat si sono potute ricavare numericamente diverse proprietà di bulk dei nuclei quali l'energia di separazione e l'energia di legame totale, disponendo inoltre di un confronto con i valori sperimentali e i valori calcolati *ab initio*. Lo scarto osservato tra l'esperimento e i valori NNLOsat è di massimo 2.2 MeV ed è indicatore della precisione del calcolo *ab initio*. L'esito del calcolo delle energie di separazione tramite IKS riporta uno scarto massimo di 1.879 MeV dai valori *ab initio* ed è un'indicazione dell'errore numerico associato alla procedura di inversione.

Per quanto riguarda l'energia di legame totale è stato compiuto il tentativo di calcolo numerico a partire dal valore di aspettazione dell'hamiltoniana del sistema, seguendo l'ipotesi di trattare tutti i contributi di scambio e correlazione e di interazione coulombiana del sistema all'interno di un potenziale di Hartree efficace dato dal potenziale di

Kohn-Sham. La discrepanza ottenuta tra i valori calcolati *ab initio* e i valori derivanti dall'IKS mostra il limite di una tale approssimazione.

Il confronto tra i risultati ottenuti a partire da due tipi di densità *ab initio* diversi è stato utile per constatare che il metodo di IKS è in grado di ottenere buoni risultati per i potenziali efficaci, ed è ipotizzabile che le difficoltà riscontrate con le densità Monte Carlo abbiano un'origine fisica nel calcolo *ab initio* delle densità stesse, in particolare per quanto riguarda il comportamento asintotico delle code.

Infine è stato possibile effettuare un confronto tra due metodi IKS diversi, uno di natura iterativa proposto da van Leeuwen e Baerends (vLB) e descritto in dettaglio in questo elaborato e l'altro basato su un principio variazionale, il Constrained Variational (CV). Si è riscontrata un'ottima compatibilità tra i due metodi, riportando un'incertezza relativa alla scelta del metodo trascurabile rispetto all'incertezza legata alla scelta del metodo *ab initio*, permettendo così la verifica di comportamenti distinti per densità differenti.

In conclusione i risultati ottenuti dall'applicazione dell'Inverse Kohn-Sham ai casi considerati nel presente lavoro incorraggiano a proseguire il percorso di inversione di densità *ab initio* con lo scopo di arrivare fino al funzionale dell'energia. Prima di compiere un passo così grande risulta necessario tenere conto delle considerazioni emerse con il fine di consolidare i metodi e le tecniche utilizzate per renderle sufficientemente generali e automatizzate.

L'obiettivo finale è infatti quello di utilizzare il metodo di Inverse Kohn-Sham applicandolo a sistemi in cui la densità varia con continuità in modo da ottenere il funzionale dell'energia in modo analitico o numerico tramite l'integrale di linea di van Leeuwen e Baerends come proposto in [GCS09]. Naturalmente questo implica trovare sistemi nucleari con densità variabili in maniera continua, non come i veri nuclei, ad esempio come nucleoni confinati in un potenziale di oscillatore armonico, in cui il potenziale confinante può essere fatto variare con continuità.

Appendice A

Derivate funzionali

Possiamo definire la derivata funzionale di $F[f]$ in $f(x)$ come la generalizzazione della ordinaria derivata parziale

$$\frac{\partial F}{\partial f_i} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F(f_1, \dots, f_i + \epsilon, \dots, f_n) - F(f_1, \dots, f_i, \dots, f_n)}{\epsilon} \quad (\text{A.0.1})$$

nella coordinata f_i appartenente all'insieme discreto dei punti della funzione f . Passando al continuo l'insieme delle f_i diventa la funzione $f(x)$, portando così alla derivata funzionale

$$\frac{\delta F}{\delta f(y)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(x) + \epsilon \delta(x - y)] - F[f(x)]}{\epsilon} \quad (\text{A.0.2})$$

Calcoliamo ora la derivata funzionale di $F[f] = \int d\mathbf{x} g(\mathbf{x}) f(\mathbf{x})$. Calcoliamo separatamente

$$\begin{aligned} F[f(\mathbf{x}) + \epsilon \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})] &= \int d\mathbf{x} g(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x} g(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\ &= F[f(\mathbf{x})] + \epsilon g(\mathbf{y}) \end{aligned} \quad (\text{A.0.3})$$

così che applicando la definizione (A.0.2) otteniamo

$$\frac{\delta F}{\delta f(\mathbf{y})} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(\mathbf{x}) + \epsilon \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})] - F[f(\mathbf{x})]}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon g(\mathbf{y})}{\epsilon} = g(\mathbf{y}) \quad (\text{A.0.4})$$

Affrontiamo quindi il problema variazionale del trovare un minimo del funzionale (2.1.10), imponendo anche la seguente condizione:

$$\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N \quad (\text{A.0.5})$$

Ci troviamo quindi nella situazione di trovare un minimo vincolato, per cui alla condizione

$$\delta E = 0 \quad (\text{A.0.6})$$

va aggiunto il vincolo $G[\rho] = 0$, dove $G[\rho] = \int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - N = 0$ che corrisponde al vincolo sul numero di particelle.

Il vincolo entra nell'equazione (A.0.6) tramite l'aggiunta di un moltiplicatore di Lagrange λ e diventa di conseguenza:

$$\frac{\delta E}{\delta \rho} - \lambda \frac{\delta G}{\delta \rho} = 0 \quad (\text{A.0.7})$$

Calcoliamo le derivate funzionali, per $G[\rho]$ utilizziamo la relazione (A.0.4) ottenendo

$$\frac{\delta G[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} = 1 \quad (\text{A.0.8})$$

Mentre esplicitando il calcolo per $E[\rho] = F[\rho] + \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) v_{ext}(\mathbf{r})$ abbiamo che

$$\begin{aligned} E[\rho(\mathbf{r}') + \epsilon \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})] &= F[\rho(\mathbf{r}') + \epsilon \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})] + \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') v_{ext}(\mathbf{r}') \\ &\quad + \epsilon \int d\mathbf{r}' \delta^3(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) v_{ext}(\mathbf{r}') \\ &= F[\rho(\mathbf{r}') + \epsilon \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})] + \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') v_{ext}(\mathbf{r}') + \epsilon v_{ext}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.0.9})$$

e sviluppando in serie di potenze di ϵ il primo addendo

$$\begin{aligned} E[\rho(\mathbf{r}') + \epsilon \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})] &= F[\rho(\mathbf{r}')] + \epsilon \frac{\delta F}{\delta \rho(\mathbf{r}')} [\rho(\mathbf{r})] + \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') v_{ext}(\mathbf{r}') + \epsilon v_{ext}(\mathbf{r}) \\ &\quad + O(\epsilon^2) \\ &= E[\rho(\mathbf{r}')] + \epsilon \left(\frac{\delta F}{\delta \rho(\mathbf{r}')} [\rho(\mathbf{r})] + v_{ext}(\mathbf{r}) \right) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (\text{A.0.10})$$

Applicando la definizione troviamo quindi che

$$\begin{aligned} \frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{E[\rho(\mathbf{r}') + \epsilon \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})] - E[\rho(\mathbf{r}')] }{\epsilon} \\ &= \frac{\delta F}{\delta \rho(\mathbf{r}')} [\rho(\mathbf{r})] + v_{ext}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.0.11})$$

Quindi ricomponendo la (A.0.7) con la (A.0.8) e la (A.0.11) otteniamo il moltiplicatore di Lagrange μ

$$\mu = v_{ext}(\mathbf{r}) + \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \quad (\text{A.0.12})$$

Bibliografia

- [Acc+20] G. Accorto et al. “First step in the nuclear inverse Kohn-Sham problem: From densities to potentials”. In: *Phys. Rev. C* 101 (2 feb. 2020), p. 024315. DOI: 10.1103/PhysRevC.101.024315. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.101.024315>.
- [BHR03] Michael Bender, Paul-Henri Heenen e Paul-Gerhard Reinhard. “Self-consistent mean-field models for nuclear structure”. In: *Rev. Mod. Phys.* 75 (1 gen. 2003), pp. 121–180. DOI: 10.1103/RevModPhys.75.121. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.75.121>.
- [BM98] Aage Bohr e Ben R. Mottelson. *Nuclear Structure*. 1998.
- [Col18] Gianluca Colò. “Heavy nuclei: Introduction to density functional theory and variations on the theme”. In: *The European Physical Journal Plus* 133 (dic. 2018). DOI: 10.1140/epjp/i2018-12391-4.
- [Col20] G. Colò. “Nuclear density functional theory”. In: *Advances in Physics: X* 5 (gen. 2020), p. 1740061. DOI: 10.1080/23746149.2020.1740061.
- [DDD87] H. De Vries, C.W. De Jager e C. De Vries. “Nuclear charge-density-distribution parameters from elastic electron scattering”. In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 36.3 (1987), pp. 495–536. ISSN: 0092-640X. DOI: [https://doi.org/10.1016/0092-640X\(87\)90013-1](https://doi.org/10.1016/0092-640X(87)90013-1). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0092640X87900131>.
- [Dug+16] T. Duguet et al. “Ab initio calculation of the potential bubble nucleus ^{34}Si ”. In: *Physical Review C* 95 (nov. 2016). DOI: 10.1103/PhysRevC.95.034319.
- [EHM09] E. Epelbaum, H.-W. Hammer e Ulf-G. Meißner. “Modern theory of nuclear forces”. In: *Rev. Mod. Phys.* 81 (4 dic. 2009), pp. 1773–1825. DOI: 10.1103/RevModPhys.81.1773. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.1773>.
- [GCS09] Alex P. Gaiduk, Sergey K. Chulkov e Viktor N. Staroverov. “Reconstruction of Density Functionals from KohnSham Potentials by Integration along Density Scaling Paths”. In: *Journal of Chemical Theory and Computation* 5.4 (2009). PMID: 26609574, pp. 699–707. DOI: 10.1021/ct800514z. URL: <https://doi.org/10.1021/ct800514z>.
- [Hig] NRC Kurchatov Institute High Energy Physics Division. URL: <http://dbserv.pnpi.spb.ru/elbib/tablisot/toi98/www/astro/table2.pdf>.
- [HK64] P. Hohenberg e W. Kohn. “Inhomogeneous Electron Gas”. In: *Phys. Rev.* 136 (3B nov. 1964), B864–B871. DOI: 10.1103/PhysRev.136.B864. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864>.

- [JW18] Daniel S. Jensen e Adam Wasserman. “Numerical methods for the inverse problem of density functional theory”. In: *International Journal of Quantum Chemistry* 118.1 (2018), e25425. DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.25425>. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/qua.25425>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qua.25425>.
- [Kor+10] M. Kortelainen et al. “Nuclear energy density optimization”. In: *Phys. Rev. C* 82 (2 ago. 2010), p. 024313. DOI: 10.1103/PhysRevC.82.024313. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.82.024313>.
- [KS65] W. Kohn e L. J. Sham. “Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects”. In: *Phys. Rev.* 140 (4A nov. 1965), A1133–A1138. DOI: 10.1103/PhysRev.140.A1133. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A1133>.
- [Lab15] NIST Physical Measurement Laboratory. *Atomic Weights and Isotopic Compositions with Relative Atomic Masses*. 2015. URL: <https://www.nist.gov/pml/atomic-weights-and-isotopic-compositions-relative-atomic-masses>.
- [LB94] R. van Leeuwen e E. J. Baerends. “Exchange-correlation potential with correct asymptotic behavior”. In: *Phys. Rev. A* 49 (4 apr. 1994), pp. 2421–2431. DOI: 10.1103/PhysRevA.49.2421. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.49.2421>.
- [Mar20] Francesco Marino. *Nuclear energy functionals grounded in ab initio calculations*. 2020. URL: <http://www0.mi.infn.it/~jroca/doc/thesis/thesis-francesco-marino-magistrale.pdf>.
- [Per+04] E. Perlińska et al. “Local density approximation for proton-neutron pairing correlations: Formalism”. In: *Phys. Rev. C* 69 (1 gen. 2004), p. 014316. DOI: 10.1103/PhysRevC.69.014316. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.69.014316>.
- [PL97] John P. Perdew e Mel Levy. “Comment on “Significance of the highest occupied Kohn-Sham eigenvalue””. In: *Phys. Rev. B* 56 (24 dic. 1997), pp. 16021–16028. DOI: 10.1103/PhysRevB.56.16021. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.56.16021>.
- [PY89] Robert G. Parr e Weitao Yang. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. 1989.
- [Sca18] Alberto Scalesi. *Teoria del funzionale della densità: dalla sezione d’urto sperimentale al potenziale di Kohn-Sham*. 2018. URL: <http://www0.mi.infn.it/~jroca/doc/thesis/thesis-alberto-scalesi.pdf>.
- [SJP05] Francesc Salvat, Aleksander Jablonski e Cedric J. Powell. “elsepa—Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules”. In: *Computer Physics Communications* 165.2 (2005), pp. 157–190. ISSN: 0010-4655. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2004.09.006>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465504004795>.

- [Som+20] V. Somà et al. “Novel chiral Hamiltonian and observables in light and medium-mass nuclei”. In: *Phys. Rev. C* 101 (1 gen. 2020), p. 014318. DOI: 10.1103/PhysRevC.101.014318. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.101.014318>.
- [SWV07] Nadine Schwierz, I. Wiedenhover e A. Volya. “Parameterization of the Woods-Saxon Potential for Shell-Model Calculations”. In: (ott. 2007).
- [VB72] D. Vautherin e D. M. Brink. “Hartree-Fock Calculations with Skyrme’s Interaction. I. Spherical Nuclei”. In: *Phys. Rev. C* 5 (3 mar. 1972), pp. 626–647. DOI: 10.1103/PhysRevC.5.626. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.5.626>.
- [WS54] Roger D. Woods e David S. Saxon. “Diffuse Surface Optical Model for Nucleon-Nuclei Scattering”. In: *Phys. Rev.* 95 (2 lug. 1954), pp. 577–578. DOI: 10.1103/PhysRev.95.577. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.95.577>.
- [WSS95] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks e R. Schiavilla. “Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking”. In: *Phys. Rev. C* 51 (1 gen. 1995), pp. 38–51. DOI: 10.1103/PhysRevC.51.38. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.51.38>.