



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

FACOLTÀ DI SCIENZE E TECNOLOGIE

CORSO DI LAUREA TRIENNALE IN FISICA

ANNO ACCADEMICO 2014/2015

SOLUZIONE DELL'EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER CON POTENZIALI NON LOCALI Applicazione ai nuclei

Relatore: Prof. Gianluca COLÒ

Correlatore: Dott. Xavier ROCA-MAZA

Autore: Gabriele MINEO

Matricola: 793897

PACS: 21.60.-n

Firma del relatore:

Indice

1	Introduzione	5
2	Hartree-Fock nucleare	7
2.1	La nozione di campo medio	7
2.2	Potenziali fenomenologici	8
2.2.1	Oscillatore armonico	9
2.2.2	Potenziale Woods-Saxon	10
2.3	Il metodo di Hartree-Fock	12
2.4	Interazioni efficaci	14
2.4.1	Skyrme	15
2.4.2	Gogny	18
2.5	Scopo del presente lavoro	22
3	Programma Hartree-Fock per nuclei a simmetria sferica	23
3.1	Introduzione	23
3.2	Approssimazione di equazioni integrodifferenziali tramite equazioni matriciali	23
3.3	Test del programma	26
3.3.1	Reticolo con passo costante	26
3.3.2	Reticolo con mappatura	28
3.4	Struttura generale del programma HF	30
3.5	Potenziale Woods-Saxon	31
3.6	Skyrme	34

4	Risultati	37
4.1	Dettagli sull'implementazione e test	37
4.2	Elio-4	42
4.3	Catena isotopica dell'Elio	43
5	Conclusioni	50

Introduzione

Un problema che accomuna vari campi della fisica è quello di descrivere le proprietà di sistemi con molte componenti in termini di interazioni fondamentali o efficaci fra di esse. Il nucleo atomico costituisce un esempio significativo in cui tale problema si manifesta. Esso è costituito da neutroni e protoni, a loro volta non elementari, soggetti ad una mutua interazione che li lega tra loro. Tuttavia, alle energie rilevanti per lo studio dei nuclei, i gradi di libertà dei quark non sono attivi e i nuclei possono essere studiati come composti da nucleoni, trattati come particelle elementari, che interagiscono tramite l'interazione nucleare efficace. Proprio la natura di questa interazione tra nucleoni, emergente dall'interazione dei costituenti elementari, rende lo studio del problema nucleare a molti corpi complesso. Nel panorama della attuale ricerca si possono riconoscere tre approcci principali al problema a molti corpi nucleare: quello dei cosiddetti *modelli macroscopici*; i metodi *ab initio*; i metodi di campo medio autoconsistente.

Nell'approccio dei modelli macroscopici (come ad esempio il cosiddetto *liquid drop model*) l'energia viene parametrizzata in termini di quantità globali quali l'energia di volume, di asimmetria, e i vari parametri che compaiono al suo interno sono aggiustati fenomenologicamente [1]. Le descrizioni offerte da tale modello sono principalmente basate su modellizzazioni *ad hoc* sui nuclei stabili, dunque la capacità predittiva è ridotta qualora si voglia affrontare uno studio di nuclei esotici, ovvero lontani dalla stabilità.

Il secondo approccio, quello dei metodi *ab initio*, parte da un'interazione efficace tra nucleoni capace di descrivere i dati di scattering NN nel vuoto. Questa interazione presenta genericamente una componente fortemente repulsiva a breve distanze e necessita di teorie avanzate come la teoria Brueckner-Hartree-Fock [2], o tecniche di rinormalizzazione [3], per essere adoperata all'interno di teorie *many-body*.

Il presente lavoro si inserisce nel solco del terzo approccio, quello delle teorie di campo medio e, più in particolare, dei metodi autoconsistenti non relativistici. L'idea alla base di tutte le teorie di campo medio è che nonostante la complessità dell'interazione tra nucleoni, una precisa descrizione di molte osservabili nucleari si possa ottenere trattando i nucleoni come particelle indipendenti soggette ad un potenziale efficace ad un corpo. Sfruttando interazioni efficaci tra nucleoni con una decina di parametri aggiustati tramite fit con dati di struttura nucleare, si arriva ad accurate descrizioni delle proprietà di molti nuclei. Rispetto al primo approccio il vantaggio è quello di poter descrivere anche proprietà di nuclei esotici; rispetto al secondo approccio ha invece il particolare pregio di poter descrivere accuratamente nuclei molto grandi, mentre gli attuali metodi *ab initio* riescono a descrivere solo una piccola frazione dei nuclei della tavola di Segrè.

Lo scopo di questo lavoro è la scrittura di un programma capace di svolgere calcoli Hartree-Fock nucleari per lo studio sistematico di alcune proprietà dei nuclei finiti con interazioni a range finito. In particolare verrà adoperata l'interazione di Gogny [4], sfruttando un algoritmo su reticolo nello spazio reale per la soluzione delle equazioni integrodifferenziali con potenziali non locali derivanti dalla struttura delle equazioni Hartree-Fock.

Hartree-Fock nucleare

2.1 La nozione di campo medio

L'idea che i nucleoni all'interno del nucleo si possano descrivere come particelle indipendenti in un potenziale medio trova riscontro nelle evidenze sperimentali, derivate da esperimenti di scattering, di un loro grande cammino libero medio, dell'ordine del raggio nucleare $R_0 = r_0 A^{1/3}$ (ove $r_0 \approx 1.2$ fm), e una conseguente densità media all'interno del nucleo $\rho \approx 0.016$ fm⁻³.

Se da un lato però, per via del principio di esclusione di Pauli e dell'andamento fortemente repulsivo dell'interazione tra nucleoni a breve distanza (intorno a 0.4 fm), i nucleoni tendono a stare abbastanza distanti, permettendo dunque una schematizzazione di moto di particelle indipendenti, dall'altro, diversamente da un gas di particelle libere, nei nuclei si riscontra una superficie ben definita: lontano dal centro crescerà in intensità una forza nucleare confinante.

Tali considerazioni, qualora siano viste in analogia con quanto avviene per gli elettroni in un atomo, ci portano all'altro grande successo sperimentale di questo modello, ovvero la struttura a shell del nucleo e la previsione di energie di legame maggiori della media per i cosiddetti nuclei magici.

Sebbene manchi una controparte per i nucleoni di un potenziale centrale che svolga il ruolo del potenziale di Coulomb per gli elettroni in un atomo, il potenziale medio si può pensare come la risultante dell'azione di tutti i nucleoni.

Fatta tale premessa le possibilità sono due: da un lato si può dare una forma funzionale, con parametri fenomenologici, ad un potenziale centrale in cui le particelle si muovono indipendentemente e che riesca a descrivere le proprietà essenziali dei nuclei, come si fa ad

esempio con un potenziale fenomenologico di Woods-Saxon; oppure si possono sfruttare le autofunzioni delle equazioni di Schrödinger con uno di questi potenziali come base per un metodo variazionale autoconsistente conosciuto come metodo di Hartree-Fock, all'interno del quale si farà uso di interazioni efficaci.

Il presente lavoro si focalizzerà su quest'ultimo approccio per lo studio del *ground state* del nucleo. Daremo dunque una panoramica più specifica sui risultati principali e le nozioni fondamentali che caratterizzano il metodo di Hartree-Fock (d'ora in avanti HF), dopo aver compiuto uno studio più accurato di due potenziali fenomenologici per nuclei sferici: l'oscillatore armonico e il potenziale di Woods-Saxon.

2.2 Potenziali fenomenologici

I potenziali fenomenologici riescono a descrivere con grande precisione le caratteristiche dei sistemi nucleari una volta che i parametri siano stati fittati fenomenologicamente. Questa loro natura *ad hoc*, se rappresenta la loro potenza descrittiva da un lato, dall'altro li rende poco adatti sotto l'aspetto meramente predittivo. Tuttavia l'idea di campo medio espressa prima assume, nella formulazione del problema con questo tipo di potenziali, una struttura semplice da descrivere matematicamente. Ci si pone infatti il problema di risolvere un insieme di equazioni di Schrödinger di singola particella le cui autofunzioni sono $\phi_{nlj}^t(\mathbf{r})$, con autovalore associato ϵ_{nlj}^t , in presenza di un dato potenziale $V(\mathbf{r})$, avendo introdotto la notazione che useremo per tutto il lavoro per cui $t=\pm\frac{1}{2}$ rappresenta il valore della terza componente dell'isospin, n il numero quantico principale, l l'usuale autovalore del momento angolare, e j l'autovalore del momento angolare totale. La forma funzionale dei potenziali deve godere in questo ambito di due caratteristiche fondamentali: al fine di descrivere la mancanza di forze nette al centro del nucleo si dovrà avere che

$$\left[\frac{\partial V(r)}{\partial r} \right]_{r=0} \approx 0,$$

mentre per quanto riguarda la simulazione di un effetto confinante alla superficie, posta ad una distanza che chiameremo R_0 , si ricercherà una forma tale da garantire che la derivata sia piccata per $r \approx R_0$: ciò equivale ad affermare che le forze di richiamo, appunto l'opposto della derivata del potenziale, agiscano nei pressi della superficie e si annullino al centro del

nucleo. Una terza caratteristica, comune al caso semplicistico e per questo non menzionato della buca di potenziale quadra e del potenziale Woods-Saxon, è quella di simulare il range finito del potenziale nucleare tramite la richiesta che il potenziale si annulli oltre R_0 .

Nel caso di nuclei sferici possiamo scrivere

$$\phi_{nlj}^t(\mathbf{r}) = \frac{u_{nlj}^t(r)}{r} \sum_{\mu s} \langle l\mu \frac{1}{2}s | jm \rangle Y_{l\mu}(\theta, \phi) \chi_s \chi_t, \quad (2.1)$$

dove θ e ϕ rappresentano le coordinate angolari, $Y_{l\mu}$ è un'armonica sferica, χ_s e χ_t sono le funzioni d'onda di spin e isospin e $\langle l\mu \frac{1}{2}s | jm \rangle$ è il coefficiente di Clebsch-Gordan. La separazione della parte radiale e angolare della funzione d'onda ci porta ad un insieme di equazioni di Schrödinger radiali del tipo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{nlj}(r) + V(r)u_{nlj}(r) = \epsilon_{nlj} u_{nlj}(r).$$

La soluzione con i due potenziali di interesse è di seguito discussa.

2.2.1 Oscillatore armonico

Un potenziale, utilizzato soprattutto poiché garantisce delle soluzioni analitiche ed una trattazione semplice, che soddisfi le prime due richieste del preambolo fatto sopra è il potenziale di oscillatore armonico sferico

$$V^{O.A.}(r) = \frac{m\omega^2}{2} (r^2 - R_0^2)$$

Gli autovalori di un sistema soggetto a questo potenziale per la particella i -esima, come noto, sono equispaziati e, a meno di una costante, della forma

$$\epsilon_i = \hbar\omega \left(N_i + \frac{3}{2} \right)$$

dove, risolvendo il problema in coordinate sferiche, $N_i = 2(n_i - 1) + l_i$.

La costante dell'oscillatore ω_0 si modifica in modo da riprodurre il raggio quadratico medio del nucleo di interesse. Sfruttando la relazione che intercorre tra raggio quadratico medio di singola particella e N_i si giunge infatti alla relazione $\hbar\omega \simeq 41A^{-1/3}[\text{MeV}]$ come mostrato

ad esempio in [5].

Se il potenziale armonico ha il vantaggio di garantire soluzioni analitiche semplici da manipolare, tuttavia presenta degli svantaggi nel confronto con gli spettri sperimentali di singola particella, dovuti al non presentare, per nuclei grandi, una zona centrale piatta, e all'avere una zona superficiale troppo diffusa.

2.2.2 Potenziale Woods-Saxon

Il potenziale Woods-Saxon è un potenziale locale ad un corpo, centrale, che descrive in prima approssimazione le autofunzioni dei nucleoni all'interno del nucleo, con più accuratezza della buca di potenziale e dell'oscillatore armonico, in particolare per quanto riguarda l'andamento in prossimità della superficie, ovvero per $r \approx R_0$. La sua forma rispecchia i tre punti del semplice *ansatz* fenomenologico sopra illustrato e l'idea che il breve range di cui godono le interazioni nucleari suggerisca una forma funzionale simile tra densità della materia e potenziale medio (nel caso presente la funzione di Fermi). La forma del potenziale è

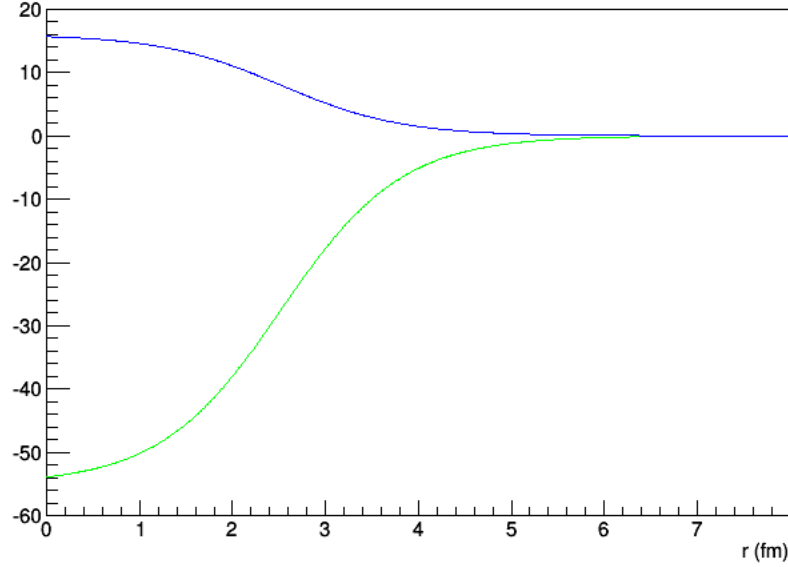
$$V^{W.S.}(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp \frac{r-R_0}{a}}$$

dove i parametri, estratti sperimentalmente, si possono trovare ad esempio in [5] e sono

$$R_0 = r_0 A^{\frac{1}{3}} \quad r_0 = 1.27 \text{ fm} \quad a = 0.67 \text{ fm} \quad V_0 = \left(51 - 33 \left(\frac{N-Z}{A} \right) \right) \text{ MeV}$$

ove N è il numero di neutroni, Z quello di protoni, A la loro somma; l'andamento del potenziale in prossimità della superficie è modulato dal fattore di diffusività a .

Figura 2.1: Potenziale Woods-Saxon (in verde) e $\rho \cdot 10^2$ (in blu). Le unità di misura per il primo sono MeV e fm^{-3} per il secondo



Fin qui la simmetria della hamiltoniana quantistica associata ad entrambi i potenziali porta ad una degenerazione dei livelli energetici ϵ_{nlj}^t associati alle equazioni di singola particella

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla^2 + V^{W.S./O.A.}(\mathbf{r}) \right) \psi_{nlj}^t(\mathbf{r}) = \epsilon_{nlj}^t \psi_{nlj}^t(\mathbf{r})$$

che non è in grado di spiegare coerentemente le proprietà associate ai numeri magici dei nuclei. L'introduzione di un potenziale spin-orbita che risolva tale degenerazione è in questo contesto facilmente realizzabile. Questo potenziale $V_{so} = f(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$, introducendo un accoppiamento tra lo spin del nucleone $\mathbf{s}$ e il suo momento angolare orbitale $\mathbf{l}$, garantisce uno splitting tra i livelli caratterizzati da $j_+ = l + \frac{1}{2}$ e $j_- = l - \frac{1}{2}$ che permette di ottenere le giuste configurazioni per le shell chiuse. Poiché si può mostrare come $f(r)$ sia grande solo intorno alla superficie nucleare la forma che si assume per tale potenziale nel caso in questione, come si vede in [5, 6], è

$$V_{so}^{W.S.}(r) = \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \frac{V_1 r_0^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(1 + \exp \frac{r-R}{a} \right)^{-1} \right]$$

con $V_1 \approx -0.44V_0$. Il potenziale $V_{so}^{W.S.}(r)$ per come è stato scritto associa energia minore al livello j_+ così come sperimentalmente osservato.

Un ultimo elemento che servirà più avanti è costituito dalla descrizione della repulsione coulombiana tra protoni all'interno del nucleo. La presenza di questo termine ovviamente indurrà una differenza tra il potenziale totale che agisce sui neutroni e sui protoni. Una scelta molto diffusa a questo proposito, riportata ad esempio in [5], è quella di schematizzare il potenziale coulombiano come quello generato da una sfera di raggio $R_c = R_0$ uniformemente carica, per cui la forma è

$$V_c = \begin{cases} \frac{Ze^2}{2R_c} \left[3 - \frac{r^2}{R_c^2} \right] & r \leq R_c \\ \frac{Ze^2}{r} & r > R_c. \end{cases}$$

2.3 Il metodo di Hartree-Fock

Il problema a molti corpi nucleare, come evidenziato precedentemente, presenta alcune peculiarità che lo rendono in qualche modo unico, come ad esempio, a differenza del caso degli elettroni in un atomo, la mancanza di una forma analitica nota per l'interazione a due corpi tra nucleoni o la non trascurabile correlazione tra nucleoni. Inoltre un qualsiasi potenziale che presenti, come ci si aspetterebbe, un *core* fortemente repulsivo, fa divergere il termine diretto nei calcoli HF, il che rende spesso indispensabile il passaggio ad interazioni efficaci.

Lo scopo principale del metodo HF è quello di passare da un modello microscopico che descriva le interazioni tra nucleoni come interazioni a due particelle, ad un potenziale medio di singola particella. Partendo da una hamiltoniana del sistema a molti corpi H contenente solo termini di interazione a due corpi

$$H = \sum_i t_i + \frac{1}{2} \sum_{ij}^A v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$$

e un'autofunzione Ψ , l'equazione di Schrödinger per il sistema in notazione bracket è $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$. Si può facilmente mostrare come questa equazione sia equivalente all'equazione variazionale

$$\delta E[\Psi] = 0$$

e che per il *ground state* valga che $E[\Psi] \geq E_0$. Tuttavia la forma di Ψ per via delle correlazioni è generalmente troppo complicata da non permettere una trattazione semplice del problema, dunque ci restringiamo ad un sottoinsieme dello spazio di Hilbert.

L'approssimazione di particelle indipendenti può essere riformulata in questo contesto esprimendo la funzione d'onda del sistema di A nucleoni, $\Phi(1, \dots, A)$, dove intendiamo $i = (\mathbf{r}_i, s_i, t_i)$, in termini di una combinazione antisimmetrizzata di funzioni d'onda di singola particella $\phi_i(j)$ tramite la forma di un *determinante di Slater*, ovvero

$$\Phi(1, \dots, A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det(\phi_i(j)_{ij})$$

Questa assunzione rappresenta la chiave di volta del metodo HF, e permette di ridurre la dimensione dello spazio di Hilbert in cui è definita la nostra base di funzioni d'onda.

Considerando per semplicità un'interazione a due corpi senza dipendenze da spin ed isospin (affronteremo questo caso nel paragrafo dedicato all'interazione di Gogny), ci aspettiamo che per piccole variazioni $\delta\Phi$ che conservino la normalizzazione delle $\phi_i(\mathbf{r})$, valga

$$\delta E[\Phi] = \langle \delta\Phi | H | \Phi \rangle = \delta \langle \Phi | H | \Phi \rangle.$$

Quindi, una volta calcolato il valore di aspettazione dell'hamiltoniana

$$\begin{aligned} \langle \Phi | H | \Phi \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i^A \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \Delta \phi_i(\mathbf{r}) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{ij} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_i(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}') + \\ &- \frac{1}{2} \sum_{ij} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_i(\mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.2)$$

e svolta la variazione su $\phi_i(\mathbf{r})$ (o sulla sua complessa coniugata), si ottiene finalmente l'equazione di singola particella

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi_i(\mathbf{r}) + \sum_j^A \int d\mathbf{r}' \phi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\phi_j(\mathbf{r}') \phi_i(\mathbf{r}) - \phi_j(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}')) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

In questa formula ϵ_i rappresenta il moltiplicatore di Lagrange associato al vincolo della normalizzazione ed assume qui il significato fisico di energia della singola particella mentre il secondo termine del membro di sinistra è ciò che abbiamo chiamato potenziale di Hartree-Fock. Una riscrittura che riutilizzeremo spesso nel seguito dell'equazione (3) si ottiene

mettendo in evidenza la densità ad un corpo $\rho(\mathbf{r}) = \sum_j^A |\phi_j(\mathbf{r})|^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi_i(\mathbf{r}) + \left(\int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right) \phi_i(\mathbf{r}) - \sum_j^A \int d\mathbf{r}' \phi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}') = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

In questa riscrittura il secondo termine del membro di sinistra è quello che viene chiamato potenziale diretto, esso ha una natura locale ed ha il significato di interazione tra il nucleone i -esimo con gli altri nucleoni, la distribuzione dei quali è data da ρ ; il terzo termine, che ha carattere prettamente non-locale, conferisce all'equazione la natura integro-differenziale. Questo termine, a dispetto del termine diretto, non ha un'interpretazione semiclassica, e sorge esclusivamente dall'antisimmetrizzazione della funzione d'onda Φ , ovvero dalla natura fermionica delle particelle. La presenza delle funzioni d'onda incognite all'interno dei due potenziali rende l'equazione fortemente nonlineare. La strategia che si adopera per risolvere questo tipo di problema, proposta originariamente da Fock e Slater, è iterativa e, come viene definita, autoconsistente: si parte da un set di funzioni d'onda di prova che permettano la scrittura del termine diretto e di scambio, si risolve l'equazione integro-differenziale associata, le soluzioni così trovate si usano per scrivere nuovamente il termine diretto e di scambio; si ripete questo procedimento finché la variazione tra i livelli di particella singola tra un'iterazione e la successiva non raggiunge una precisione desiderata. Aggiungiamo infine che in questo contesto l'energia di legame totale (*binding energy* o più sinteticamente BE) assume la forma riportata nell'espressione (2) per $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$.

2.4 Interazioni efficaci

Sebbene non abbia un carattere spiccatamente fondamentale, un approccio che permetta di affrontare studi sistematici di proprietà dei sistemi nucleari, con il minor carico numerico possibile, è rappresentato dall'uso di interazioni efficaci all'interno delle equazioni HF. Queste interazioni hanno in genere una decina di parametri liberi che vengono fittati con i dati sperimentali di *bulk properties* di un gruppo di nuclei e di alcune osservabili della materia nucleare. Il comportamento di queste interazioni deve comunque soddisfare alcune irrinunciabili prescrizioni teoriche: devono presentare un breve range, i termini attrattivi e repulsivi devono bilanciarsi in modo da permettere di arrivare alla saturazione nucleare e devono presentare una dipendenza da spin e isospin. Lo spirito di questo tipo di approccio è in sintesi quello di provare a riprodurre quante più caratteristiche dei sistemi nucleari possibili con interazioni a due corpi parametrizzate direttamente con le *bulk properties* di un certo numero di nuclei. Tra le interazioni efficaci fenomenologiche studiate finora ne

discuteremo due: quella di Skyrme, di cui realizzeremo in realtà solo una versione ridotta, e quella di Gogny che introdurremo nella sua forma completa.

2.4.1 Skyrme

L'interazione originariamente proposta da Skyrme [7] è un'interazione efficace che presenta una dipendenza dalle coordinate spaziali a range nullo, del tipo $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Questa dipendenza ha sostanzialmente il vantaggio di semplificare l'equazione (2) riducendola ad un'equazione squisitamente locale e dunque puramente differenziale. Nonostante sia un'interazione descrivibile come interazione di contatto, il range finito viene simulato tramite la dipendenza dal momento e una dimostrazione di questo fatto è data ad esempio nel cap. 4 di [6], o nella descrizione dell'interazione nell'articolo di Vautherin e Brink [8]. L'interazione si compone di un termine a due corpi ed uno a tre corpi. Il termine a due corpi è

$$v_{12} = t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \frac{1}{2} t_1 [\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] + \\ + t_2 \mathbf{k}' \cdot \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k} + i W_0 (\sigma_1 + \sigma_2) \cdot \mathbf{k}' \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k},$$

dove $\mathbf{k} = (\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2i$ che agisce sulla destra mentre $\mathbf{k}' = -(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)/2i$ agisce sulla sinistra, σ_1, σ_2 sono le matrici di spin di Pauli, $P_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \sigma_1 \cdot \sigma_2)$ è l'operatore di scambio di spin, t_0 è il parametro per la componente centrale del potenziale, t_1 e t_2 i parametri per i termini non locali ed infine W_0 è il parametro per la componente spin-orbita. Il termine a tre corpi,

$$v_{123}^{(3)} = t_3 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3),$$

nel caso dello stato fondamentale dei nuclei sferici pari-pari si può scrivere come un termine a due corpi dipendente dalla densità

$$v_{12}^{(3)} = \frac{t_3}{6} (1 + P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right)$$

con α ad indicare un esponente per la densità.

Molte versioni modificate e semplificate dell'interazione di Skyrme sono state usate per calcoli HF nucleari, si vedano ad esempio le referenze [9, 10], per affrontare in modo via via più semplice o più particolare alcuni aspetti specifici. Poiché il nostro scopo è affrontare dal punto di vista numerico equazioni HF con potenziali non locali nello spazio reale con un

approccio matriciale, e dal momento che molti programmi che risolvono le equazioni differenziali di HF con interazioni di Skyrme sono stati scritti [8][11][12] per studiare proprietà dei nuclei, sfrutteremo un'interazione di Skyrme molto semplice principalmente per testare il programma e non secondariamente perché il termine dipendente dalla densità compare anche nell'interazione di Gogny. L'interazione che ci interessa tiene conto solamente del termine centrale, il cui parametro associato è quello che abbiamo chiamato t_0 (assieme ad un secondo parametro x_0), e del termine a tre corpi, i cui parametri associati, come visto, sono t_3 e x_3 : questi parametri saranno fittati per riprodurre la saturazione di alcuni nuclei di interesse. D'ora in poi ci riferiremo a questa interazione come $t_0 - t_3$

$$v_{t_0-t_3}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = t_0 (1 + x_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \frac{t_3}{6} (1 + x_3 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right)$$

Poiché l'interazione verrà utilizzata come test per il programma i parametri sono stati aggiustati con proprietà dei nuclei finiti trascurando l'effetto dell'interazione coulombiana. In particolare il fit è stato realizzato con un test χ^2 con i dati sperimentali per le energie di legame dei nuclei ^{40}Ca , ^{48}Ca , ^{56}Ni , ^{132}Sn , ^{208}Pb e dei loro raggi di carica, fatta eccezione per quello del ^{132}Sn ancora non misurato sperimentalmente. Nella tabella 1 riportiamo i quattro parametri utilizzati.

Tabella 2.1: Parametri dell'interazione $t_0 - t_3$

t_0 [MeV fm ³]	t_3 [MeV fm ⁶]	x_0	x_3
$-0.970 \cdot 10^3$	$16.371 \cdot 10^3$	$8.334 \cdot 10^{-3}$	$-206.223 \cdot 10^{-3}$

Nel caso di interazioni di Skyrme la deduzione delle equazioni HF è svolta in tutti i dettagli nell'appendice di [8], noi riportiamo qui i dettagli salienti. Si inizia scrivendo il valore di aspettazione dell'hamiltoniana come integrale di una densità hamiltoniana

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \int d\mathbf{r} H(\mathbf{r})$$

Per i nuclei pari-pari si può sfruttare l'ipotesi che se lo stato di singola particella $|\phi_i\rangle$ è occupato anche il time-reversed lo è, e la proprietà delle matrici di Pauli di avere traccia nulla, per arrivare a scrivere che il contributo del termine centrale (t_0) è

$$H_0 = \frac{t_0}{2} \left[\left(1 + \frac{1}{2}x_0\right) \rho^2 - \left(x_0 + \frac{1}{2}\right) (\rho_n^2 + \rho_p^2) \right],$$

mentre quello del termine a tre corpi (t_3) è

$$H_3 = \frac{t_3}{24} \rho^\alpha \left[(2 + x_3) \rho^2 - (2x_3 + 1) (\rho_n^2 + \rho_p^2) \right].$$

In questa formula $\rho_t(\mathbf{r}) = \sum_{i,\sigma} |\phi_i(\mathbf{r}, \sigma, t)|^2$ è la densità locale di protoni o neutroni e ρ la densità locale totale. Applicando infine il principio variazionale già menzionato si ottiene che la forma delle equazioni HF con quest'interazione è quella di un'equazione di Schrödinger con potenziali $V_i^{(t)}(r) = \frac{\delta H_i}{\delta \rho_t}$ differenti per neutroni e protoni, con i ad indicare il termine centrale o il termine a tre corpi e t la terza componente dell'isospin. Nel caso di nuclei sferici con shell doppiamente chiuse, una volta separate parte radiale e angolare (e di spin/isospin) della funzione d'onda come in (1), possiamo integrare sull'angolo solido la densità $\rho(\mathbf{r})$ ottenendo una funzione dipendente solamente dalla coordinata radiale r

$$\rho_t(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{nlj} (2j+1) u_{nlj}^2(r).$$

Riscrivendo l'equazione radiale per la particella k-esima otteniamo infine

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{np}} \left(\nabla^2 - \frac{l_k(l_k+1)}{r^2} \right) u_{n_k l_k j_k}(r) + U_{t_0-t_3}(r) u_{n_k l_k j_k}(r) = E_{n_k l_k j_k} u_{n_k l_k j_k}(r) \quad (2.5)$$

dove

$$U_{t_0-t_3}(r) = \left[\frac{t_0}{2} ((2 + x_0) \rho - (2x_0 + 1) \rho_{q_k}) + \frac{t_3}{24} ((5 + x_3) \rho^2 - 2(x_3 + 1) \rho_{q_k}^2) \right]. \quad (2.6)$$

Un punto molto importante da sottolineare, comune tra l'altro all'interazione di Gogny, è che in presenza di un termine a tre corpi *density dependent*, l'energia di legame assume una forma leggermente diversa [13][14], dovendo tener conto al suo interno di un cosiddetto termine di *rearrangement*. La quantità da sottrarre all'energia totale in tal caso è la somma degli elementi di matrice antisimmetrizzati

$$E_r = \sum_{ij} \left\langle ij \left| \rho \frac{\partial V}{\partial \rho_i} \right| ij \right\rangle$$

in cui $V = \frac{t_3}{6} (1 + x_3 P_\sigma) \rho^\alpha \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Sfruttando le stesse ipotesi usata per dedurre la forma a due corpi dell'interazione a tre corpi e integrando si ottiene in definitiva il risultato [12]

$$E_r = \frac{t_3}{24} \alpha \rho^{\alpha-1} \left(\left(1 + \frac{x_3}{2} \right) \rho^2 - \left(x_3 + \frac{1}{2} \right) (\rho_p^2 + \rho_n^2) \right).$$

Nella forma completa dell'interazione la densità hamiltoniana è un funzionale di tre densità, la prima è quella locale ρ , che abbiamo già analizzato, la seconda è la densità di energia cinetica $\tau(r)$ che non analizzeremo, ed infine, legata al termine spin-orbita, vi è una terza densità detta di spin, $J(r)$, che vedremo più da vicino discutendo l'interazione di Gogny. Come si può vedere, le equazioni così dedotte si possono risolvere numericamente nello spazio reale con algoritmi tipo Numerov o Runge-Kutta (come in [8]), poiché puramente differenziali.

2.4.2 Gogny

L'oggetto principale del presente lavoro è l'utilizzo di un'interazione a range finito all'interno di un calcolo HF. L'interazione scelta è quella di Gogny [4], in cui i termini t_0 , t_1 e t_2 dell'interazione di Skyrme vengono sostituiti con la somma di due gaussiane con diverso range, combinate con operatori di scambio di spin e isospin, nella forma introdotta da Brink e Boeker in [15], e mantenendo il termine spin-orbita e quello a tre corpi. La componente suggerita da Brink e Boeker da sola non è infatti in grado di predire con sufficiente precisione le energie di legame (BE) dei nuclei, a tale proposito si possono vedere alcuni risultati pubblicati in [16] in cui si fa uso della parametrizzazione B1.

Per quanto riguarda questo lavoro utilizzeremo la forma completa dell'interazione, ovvero, scrivendo già il termine density-dependent a tre corpi come interazione a due corpi,

$$v_{12} = \sum_{i=1}^2 (W_i + B_i P_\sigma - H_i P_\tau - M_i P_\sigma P_\tau) e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}{\mu_i}} + \\ + iW_0 (\sigma_1 + \sigma_2) \mathbf{k}' \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \mathbf{k} + \\ + t_3 (1 + P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right).$$

I parametri sono stati fittati con proprietà dei nuclei finiti, in particolare con le proprietà di saturazione dello ^{16}O e ^{90}Zr e di alcuni dati sperimentali della materia nucleare, tranne che per W_0 che viene fittato separatamente per riprodurre il valore sperimentale dello splitting $p_{\frac{3}{2}} - p_{\frac{1}{2}}$ dello ^{16}O . Sono presentati in [4] e riportati in tabella.

Tabella 2.2: Parametri dell'interazione di Gogny D1

i	μ_i [fm]	W_i	B_i	H_i	M_i	$W_0 = 115 [MeV fm^5]$
1	0.7	-402.4	-100	-496.2	-23.56	$t_3 = 1350 [MeV fm^4]$
2	1.2	-21.30	-11.77	37.27	-68.81	

Quest'interazione, a differenza di quella Skyrme, preserva la forma integro-differenziale del potenziale di scambio, rendendo il lavoro numerico nello spazio reale ben più impegnativo. La deduzione delle equazioni HF radiali di singola particella in forma analitica, nel presente caso, sfrutta principalmente due strumenti teorici: l'espansione multipolare e il teorema di Wigner-Eckhart. Per affrontare la teoria che ora descriveremo una buona traccia molto generale e che presenta i risultati essenziali si può trovare in [16]; una versione meno dettagliata, che però ha il vantaggio di lavorare direttamente con l'interazione che stiamo trattando mettendone in luce alcuni salienti aspetti è invece quella dell'articolo originale [4]. Scriviamo la parte a range finito della presente interazione come

$$v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{p=1}^4 v_p(|\mathbf{r}_{12}|) O_p(1, 2)$$

dove gli operatori $O_p(1, 2)$ sono rispettivamente $1, \tau_1 \cdot \tau_2, \sigma_1 \cdot \sigma_2$ e $\tau_1 \cdot \tau_2 \sigma_1 \cdot \sigma_2$ con $p = 1, \dots, 4$ ad indicare il canale dell'interazione e $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Inserendo nell'equazione di HF (3) per la particella k-esima la funzione d'onda scritta come

$$\phi_{nlj}^t(\mathbf{r}) = \frac{u_{nlj}^t(r)}{r} \sum_{\mu s} \langle l\mu \frac{1}{2} s | jm \rangle Y_{l\mu}(\theta, \phi) \chi_s \chi_t,$$

si dovrà moltiplicare a sinistra per $\langle l_k j_k m_k t_k |$, integrare e sommare nelle variabili angolari di spin e di isospin per ottenere l'equazione radiale di singola particella cercata

$$-\frac{\hbar^2}{2m_k} \left(\nabla^2 - \frac{l_k(l_k+1)}{r^2} \right) u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) + U_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) - F_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) = \epsilon_{n_k l_k j_k}^{t_k} u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r). \quad (2.7)$$

Tuttavia, poichè l'interazione dipende dalla distanza relativa tra i nucleoni, mentre l'equazione HF radiale dipende dalle distanze r e r' dall'origine del sistema di riferimento, si dovrà separare la dipendenza delle coordinate spaziali in $v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Scrivendo l'interazione come trasformata di Fourier della sua espressione nello spazio dei momenti, ed usando l'espansione multipolare delle onde piane e le relazioni di ortogonalità tra armoniche sferiche, si ottiene in maniera diretta tale separazione. Questo metodo ci porta a scrivere le

componenti multipolari dell'interazione come

$$\begin{aligned} v_L^p(r, r') &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_0^\infty dq q^2 j_L(qr) j_L(qr') \left(\int_0^\infty dr r^2 j_0(qr) v(|\mathbf{r}_{12}|) \right) = \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_{-1}^1 d\cos\theta_{12} v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) P_L(\cos\theta_{12}), \end{aligned}$$

dove L indica il momento angolare associato all'interazione e $j_L(r)$ è l'usuale funzione di Bessel sferica di ordine L .

Per quanto riguarda la parte angolare, di spin e di isospin, separiamo la trattazione per il termine diretto e quello di scambio.

Nel primo tutta la geometria del problema si semplifica, rimane soltanto la componente multipolare $L = 0$, e gli unici canali a dare contributi non nulli sono quello scalare e quello di isospin. Quest'ultimo risultato si mostra in modo analogo a quanto fatto nel caso di Skyrme, sfruttando cioè l'invarianza per inversione temporale e l'annullarsi delle tracce delle matrici di Pauli. Il termine diretto assume dunque la forma

$$\left[U_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) \right]_p = 4\sqrt{2\pi} \int dr' r'^2 v_0^p(r, r') I_k^{(p)}(r')$$

dove

$$I_k^{(1)}(r') = \rho(r) \quad e \quad I_k^{(2)} = 2t_k [\rho_p(r) - \rho_n(r)].$$

La struttura del termine di scambio è invece più complessa poiché tutti i canali contribuiscono. Riscrivendo quest'ultimo tramite la (1), ci si trova a maneggiare quadrati di elementi di matrice di operatori tensoriali, la trattazione dei quali si affronta usando il teorema di Wigner-Eckart. Sfruttando in questo caso l'ortonormalità dei coefficienti di Clebsch-Gordan che entrano in gioco e le proprietà che permettono di passare da tali coefficienti ai simboli $3j$ di Wigner si arriva alla forma finale del potenziale di scambio

$$\begin{aligned} \left[F_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) \right]_p &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{n_z l_z j_z t_z} (2j_z + 1) \int dr' u_{n_z l_z j_z}^{t_z}(r) u_{n_z l_z j_z}^{t_z}(r') u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r') \\ &\quad \sum_L \xi(l_k + l_i + L) (2L + 1) v_L^p(r, r') T^{(p)} w_{ki}^{(p)} \end{aligned}$$

dove $\xi(l) = \frac{1}{2} [1 + (-1)^l]$ garantisce la conservazione della parità, $T^{(p)}$ deriva dalla valutazione degli elementi di matrice degli operatori di isospin ed un facile calcolo mostra che

vale

$$T^p = \begin{cases} \delta_{t_k, t_z} & p = 1, 3 \\ 2\delta_{t_k, -t_z} + \delta_{t_k, t_i} & p = 2, 4. \end{cases}$$

Infine si hanno i due operatori w_{ki}^p derivanti dagli elementi di matrice ridotta al quadrato

$$w_{ki}^p = \begin{cases} \left(\begin{pmatrix} j_k & j_i & L \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \right)^2 & p = 1, 2 \\ 2 \left[\left(\begin{pmatrix} l_k & l_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} j_k & j_i & L \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \right)^2 \right] & p = 3, 4 \end{cases}$$

in cui il primo simbolo $3j$ deriva dall'aver considerato l'elemento di matrice ridotta di un'armonica sferica semplice, mentre nel secondo caso di un'armonica sferica per l'operatore di spin. Una trattazione più ampia di questi elementi di matrice ridotti si può vedere nelle appendici di [5] o [17].

Un'importante correzione che qui tratteremo solo nella versione più semplice è legata al moto del centro di massa. Infatti l'energia totale si ottiene in via più generale sottraendo l'energia cinetica associata al moto del centro di massa $\mathbf{P}^2/2mA$ alla hamiltoniana a molti corpi. Come si può vedere ad esempio in [8], l'energia cinetica del centro di massa è riscrivibile come

$$\frac{\mathbf{P}^2}{2mA} = \frac{1}{2mA} \left(\sum_{i=1}^A \mathbf{p}_i \right)^2 = \frac{1}{2mA} \sum_{i=1}^A \mathbf{p}_i^2 + \frac{1}{2mA} \sum_{i \neq j}^A \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j,$$

in questa formula il primo termine è locale e ad un corpo, ed è quello che includeremo, mentre il secondo termine ha natura non locale e, ad eccezione del caso in cui il calcolo si faccia su una base, di difficile calcolo. In sintesi la correzione qui trattata introdurrà una riduzione nell'energia cinetica di singola particella in modo tale che

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} = K_{cm} \frac{\hbar^2}{2m} = \left(1 - \frac{1}{A} \right) \frac{\hbar^2}{2m}.$$

Come si vede una correzione del genere è importante qualora si considerino nuclei piccoli ($K_{cm} = 0.75$ nel caso di 4He) mentre sostanzialmente inessenziale nel caso di nuclei molto grandi ($K_{cm} \simeq 0.995$ nel caso del ${}^{208}Pb$).

L'unica parte ancora non considerata dell'interazione è quella spin-orbita. La forma di tipo Skyrme permette di svolgere un calcolo che condivide i tratti generali con i due termini

dedotti nella sezione precedente, tranne per il fatto che la densità hamiltoniana adesso sarà il funzionale di una densità di spin $J_t(r)$. Anche per questo termine i dettagli della deduzione del potenziale sono contenuti nell'appendice di [8]. Il risultato è

$$W_{ls}^{t_k}(r) = W_0 \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (\rho(r) + \rho_{t_k}(r)) \langle j_k l_k || \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} || j_k l_k \rangle - \left(\frac{1}{r} + \frac{d}{dr} \right) (J(r) + J^{t_k}(r)) \right]$$

in cui

$$J^q = \frac{1}{2\pi r^3} \sum_z (2j_z + 1) \langle j_z l_z || \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} || j_z l_z \rangle \left(u_{n_z j_z l_z}^{t_z}(r) \right)^2.$$

2.5 Scopo del presente lavoro

Il presente lavoro è finalizzato principalmente allo studio delle proprietà dei ground state nucleari tramite calcoli HF nello spazio reale con interazione di Gogny. I programmi usati finora per risolvere questo tipo di equazioni lavorano su una base di oscillatore armonico e non nello spazio reale, questo sostanzialmente per le semplificazioni portate numericamente da tale approccio, oppure sfruttando un'approssimazione detta LDA come in [18], in cui il termine di scambio risulta essere locale. La base di oscillatore armonico ha però il grosso svantaggio di descrivere stati troppo legati che decrescono asintoticamente troppo rapidamente, la descrizione di stati debolmente legati è dunque imprecisa in calcoli che sfruttino tale base. Lavorare nello spazio reale può a questo punto essere una soluzione a questo problema. Il programma che è stato scritto, presentato nel capitolo successivo, sfrutta il metodo di Hooverman descritto in [19], il quale ha il vantaggio di dare due tipi di densità al reticolo unidimensionale che si utilizza per risolvere le equazioni di Schrödinger radiali, una costante e con alta densità per la parte interna dei nuclei (o fin oltre la superficie come vedremo), ed una con punti via via più distanti tra loro per simulare i comportamenti asintotici delle funzioni d'onda. In ultima analisi ci si aspetta che questo metodo sia più efficace per trattare sistemi debolmente legati di quanto non sia la soluzione HF su una base.

Capitolo 3

Programma Hartree-Fock per nuclei a simmetria sferica

3.1 Introduzione

Di seguito riportiamo il metodo usato per risolvere le equazioni integrodifferenziali non-locali, le caratteristiche essenziali e i test del programma Hartree-Fock. Dopo aver introdotto il formalismo matriciale e il metodo della rimappatura, l'obiettivo del presente capitolo sarà dare un'idea della struttura del programma, qui nella sua versione più estesa, valutarne la precisione numerica e l'accuratezza dei risultati tramite paragoni con altri programmi, per le due interazioni introdotte nel capitolo precedente, un'interazione di Skyrme semplificata e l'interazione di Gogny D1S.

3.2 Approssimazione di equazioni integrodifferenziali tramite equazioni matriciali

L'obiettivo è integrare equazioni del tipo (3) in problemi con simmetria sferica, in cui le equazioni assumono una forma tipo (4), (5) o più in generale (7), nello spazio reale. Un metodo semplice ed efficace è quello di riportare il problema su un reticolo monodimensionale finito [19]. Trascurando momentaneamente la questione delle condizioni di bordo all'infinito, prendiamo un reticolo di lunghezza L costituito da n punti equispaziati con passo $\Delta = \frac{L}{n+1}$, in cui $0 \leq r \leq L$ e i punti sono r_i con $i = 1, \dots, n$.

In tal caso un'equazione della forma generale

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{nl}(r) + U(r)u_{nl}(r) + \int_0^\infty dr' v(r, r') u_{nl}(r') = E_{nl} u_{nl}(r),$$

dove $U(r)$ è un potenziale locale e $v(r, r')$ il potenziale nonlocale, assume la forma discretizzata

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\delta_{j,i+1} - 2\delta_{j,i} + \delta_{j,i-1}}{\Delta^2} u_{n_k l_k}(r_j) - \frac{l_k(l_k+1)}{r_i^2} u_{n_k l_k}(r_i) \right) + \\ + U(r_i) u_{n_k l_k}(r_i) + \sum_{j=1}^n \Delta v(r_i, r_j) u_{n_k l_k}(r_j) = \epsilon_{n_k l_k} u_{n_k l_k}(r_i) \quad i, j = 1, \dots, n,$$

in cui si è fatto uso della formula per il laplaciano discretizzato e la regola dei trapezi per l'integrale. Imposte le condizioni al contorno $u(0) = 0$ e $u(n+1) = 0$ e avendo scritto che $u(r_i) = u_i$ sono le componenti del vettore U a n dimensioni, l'equazione assume la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (K - C) U + DU + FU = HU = EU$$

avendo definito, rispettivamente, la matrice laplaciana K , le matrici diagonali centripeta C e potenziale D e infine la matrice di scambio F come

$$K_{ij} = \frac{\delta_{i,j+1} - 2\delta_{i,j} + \delta_{i,j-1}}{\Delta^2} \quad C_{ij} = \frac{l(l+1)}{r_i^2} \delta_{ij} \quad D_{ij} = U(r_i) \delta_{ij} \quad F_{ij} = v_l(r_i, r_j) \Delta.$$

Il problema ha ora assunto una forma matriciale: trovare l'insieme degli autovalori e delle autofunzioni relative (ossia gli autovettori) significa dunque diagonalizzare la matrice H tramite metodi come quelli presentati in gran dettaglio nel capitolo 11 di [20] e nelle molte referenze al suo interno.

Tuttavia il problema delle condizioni di bordo nel limite in cui $r \rightarrow +\infty$ risulta inattuabile seguendo tale metodo, e nel caso in cui si voglia minimizzare il numero di punti sul reticolo è fondamentale avere dei punti a grandi distanze dall'origine del sistema di riferimento che permettano una corretta descrizione degli andamenti asintotici. La questione della minimizzazione dei punti sul reticolo non è un argomento sottovalutabile, dacché, nonostante oggi esistano routine capaci di diagonalizzare matrici di dimensione 5000×5000 in pochi minuti, si vedano ad esempio le librerie per c++ di Armadillo [21] e Gsl, un programma HF ha bisogno di una ventina di iterazioni almeno per raggiungere la convergenza, nei casi più semplici. Una soluzione a tal proposito presentata da Hooverman in [19] è quella di

rimappare la semiretta $0 \leq r < +\infty$ in un intervallo finito $0 \leq s < 1$ biunivocamente, suddividere quest'ultimo in n punti e, a meno di una funzione peso, procedere esattamente come sopra. Il caso fisico che stiamo studiando suggerisce la suddivisione del reticolo in due zone: una più densa con spaziatura costante entro un certo valore $r=A$; un'altra costituita da punti via via più distanti in modo tale da simulare il limite $r \rightarrow +\infty$. Si definisce dunque una nuova variabile $s(r)$ monotona e biunivoca, tale che $s(0) = 0$ e $s(r) \rightarrow 1$ per $r \rightarrow +\infty$. Introdotta dunque la funzione $w(s) = \sqrt{\frac{ds}{dr}}$ si possono scrivere l'autofunzione pesata $\tilde{u}(s) = \frac{u(r(s))}{w(s)}$ e il potenziale pesato

$$\tilde{v}(s, s') = \frac{v(r(s), r(s'))}{w(s)w(s')},$$

che permettono di scrivere l'equazione come

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[w^2(s) \frac{d^2}{ds^2} w^2 s - w^3(s) w''(s) - \frac{l(l+1)}{r^2(s)} \right] \tilde{u}(s) + \int_0^1 \tilde{v}(s, s') \tilde{u}(s) ds' + = \epsilon \tilde{u}(s) \quad (3.1)$$

Abbiamo ottenuto una riscrittura dell'equazione di Schrödinger con potenziali non-locali su un reticolo rimappato. All'interno di questa equazione si può notare il termine aggiuntivo $W^3 W''$, di cui dovremo tener conto nella costruzione della matrice cinetica. La mappa che utilizzeremo in questo caso è l'unione continua di una funzione lineare e una iperbolica della forma

$$s(r) = \begin{cases} \frac{r}{2A} & 0 \leq r \leq A \\ 1 - \left(\frac{A}{2r}\right) & A \leq r \leq \infty. \end{cases}$$

La sua inversa, ossia la funzione che permette di scrivere $r = r(s)$ e il peso $w(s)$ è invece

$$r(s) = \begin{cases} 2As & 0 \leq s \leq \frac{1}{2} \\ \frac{A}{2(1-s)} & \frac{1}{2} \leq s < 1. \end{cases}$$

Da questa espressione è facile notare come tramite derivazione si possa arrivare alla forma di $w(s)$

$$w(s) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2A}} & 0 \leq s \leq \frac{1}{2} \\ \frac{2(1-s)}{\sqrt{2A}} & \frac{1}{2} \leq s < 1 \end{cases}$$

che compare nelle matrici cinetica e di scambio e al denominatore dell'autofunzione $\tilde{u}(s)$. Si noti come, date queste definizioni, la normalizzazione di $u(r)$ sull'intervallo $[0, \infty]$ equivalga alla normalizzazione di $\tilde{u}(s)$ sull'intervallo finito $[0, 1]$, si ha infatti che

$$\int_0^1 (\tilde{u}(s))^2 ds = \int_0^\infty dr \left(\frac{dr}{ds} \right)^{-1} \left(\frac{u(r(s))}{w(s)} \right)^2 = \int_0^\infty dr (u(r))^2.$$

Poiché l'equazione (8) ha per autofunzioni le funzioni pesate, questo dettaglio ci offre un utile metodo per procedere nella loro normalizzazione e successivamente passare alle funzioni d'onda.

Di seguito, prima del passaggio ai test sulla parte Hartree-Fock del codice, riportiamo una breve analisi della qualità numerica dei risultati ottenuti nel caso di potenziali con soluzione analitica nota, sia nel caso a reticolo non rimappato sia in quello rimappato.

3.3 Test del programma

3.3.1 Reticolo con passo costante

Si focalizza l'attenzione sull'equazione di Schrödinger con potenziali centrali per testare la prima parte del programma. In particolare si studia l'efficienza del metodo con reticolo a passo costante e con quello rimappato. Poiché non possiamo trattare esattamente l'andamento nel punto $r = 0$ di $u(r)/r$, del potenziale centrifugo e del potenziale coulombiano, si ha la necessità di imporre dall'esterno le condizioni al contorno, ovvero l'annullarsi della funzione $u(r)$ in $r = 0$ e in $r \rightarrow \infty$. Ciò equivale a restringere il proprio problema a $n - 2$ punti, non considerando il primo ($r = 0$) e l'ultimo. Si noti che questo punto verrà mantenuto in tutto il programma.

Studiamo allora due potenziali di cui conosciamo analiticamente le soluzioni: il potenziale armonico radiale e quello coulombiano. I primi dieci autovalori relativi ad un dato l e al tipo di potenziale vengono confrontati con il valore teorico. Per avere un'idea generale della precisione del calcolo, la quantità $\delta_{rel} = \frac{|E_n^{teo} - E_n|}{E_n^{teo}}$ viene valutata. Di seguito riportiamo i risultati per l'oscillatore armonico con un reticolo di 4000 punti con $\Delta = 0.0025$ per stati con $l = 0$ e $l = 1$ rispettivamente. In questo caso i valori teorici sono, ponendo m , $\hbar$ e ω eguali ad 1

$$E_{nl}^{teo} = (2n + l + \frac{3}{2})$$

Tabella 3.1: Oscillatore armonico su reticolo a passo costante con 4000 punti, $\Delta = 0.0025$

n	E_{n0}^{teo}	E_{n0}	δ_{rel}	E_{n1}^{teo}	E_{n1}	δ_{rel}
0	1.5	1.5	$6.5 \cdot 10^{-7}$	2.5	2.5	$0.5 \cdot 10^{-6}$
1	3.5	3.499995	$1.39 \cdot 10^{-6}$	4.5	4.499995	$1.2 \cdot 10^{-6}$
2	5.5	5.499988	$2.16 \cdot 10^{-6}$	6.5	6.49999	$1.8 \cdot 10^{-6}$
3	7.5	7.499978	$2.94 \cdot 10^{-6}$	8.5	8.49998	$2.6 \cdot 10^{-6}$
4	9.5	9.499965	$3.72 \cdot 10^{-6}$	10.5	10.49996	$3.35 \cdot 10^{-6}$
5	11.5	11.49995	$4.5 \cdot 10^{-6}$	12.5	12.49995	$4.1 \cdot 10^{-6}$
6	13.5	13.49993	$5.28 \cdot 10^{-6}$	14.5	14.49993	$4.9 \cdot 10^{-6}$
7	15.5	15.49991	$6.06 \cdot 10^{-6}$	16.5	16.49991	$5.7 \cdot 10^{-6}$
8	17.5	17.49988	$6.84 \cdot 10^{-6}$	18.5	18.49988	$6.4 \cdot 10^{-6}$
9	19.5	19.49985	$7.62 \cdot 10^{-6}$	20.5	20.49985	$7.2 \cdot 10^{-6}$

Per testare a fondo l'algoritmo e saggiare i limiti della via intrapresa si studia il potenziale coulombiano: in tal caso si è soliti introdurre il “numero quantico principale” $N = n + l + 1$. Si nota che, per un valore fissato di N , solo alcuni valori di n e l sono validi, ad esempio per $N=1$ si deve avere $n = l = 0$, per $N=2$ si possono avere $n = 1$ e $l = 0$ oppure $n = 0$ e $l = 1$ e così via.

Ancora una volta vengono fissate tutte le costanti fisiche del problema ad 1 e si tralasciano le unità di misura, così da avere:

$$E_N = -\frac{1}{2N^2}.$$

Qualora si volesse aggirare l'imposizione della condizione al contorno ponendo il primo punto del reticolo arbitrariamente vicino a $r = 0$, lanciando il programma si noterebbe subito come agli autovalori attesi per gli stati s si aggiunga un livello ad energia inaspettatamente più bassa $E_{spurio} = -846403$ cui corrisponde un'autofunzione senza nodi (come ci si aspetterebbe per la funzione d'onda $1s$), inoltre per l'autovalore $E_{1s}^{teo} = -0.5$ si riscontrebbe un valore calcolato di $E_{1s} = -0.499565$, ma a questo autovalore sarebbe associata un'autofunzione con un nodo e ciò è in contraddizione con la teoria. Si registrano infine solo tre stati legati, contro le previsioni teoriche. Passando al caso con condizioni al contorno imposte, sul reticolo a passo costante, si riescono a ritrovare i primi due autovalori: il primo con uno scarto percentuale $\delta\% = 3.0 \cdot 10^{-4}\%$, mentre per il secondo $\delta\% = 9.7551\%$. In entrambi i casi alcune caratteristiche essenziali del potenziale vengono trascurate. Sorge dunque la necessità del metodo di Hooverman.

3.3.2 Reticolo con mappatura

Si ristudiano i due casi analitici noti e si nota che tramite la rimappatura gli autovalori dell'oscillatore armonico radiale siano molto vicini ai teorici, come riportato nella tabella successiva, e presentano indipendenza dalla scelta del parametro A , come ci si aspetterebbe. Gli autovalori nel caso coulombiano sono più distanti dal valore teorico in conseguenza degli infiniti che compaiono nei punti più vicini allo zero. Ma il lato più interessante è che già con $n_{ret} = 300$ punti nel reticolo si ottengono buoni risultati: questo è fondamentale, dacché se da un lato si ricerca la massima accuratezza dei calcoli, diagonalizzare una matrice 4000×4000 richiede almeno 20 sec e questo si ripercuote sulla rapidità in un algoritmo Hartree-Fock, nel quale il processo di singola diagonalizzazione è fatto più volte per iterazione (una per ogni j considerato). Con $n_{ret} = 4000$ punti e $A = 3.9$ si raggiunge un valore molto preciso per l'autovalore dello stato fondamentale $n = 0$ e $l = 0$ dell'oscillatore armonico isotropo tridimensionale, con $\delta_{rel} = 3.6 \cdot 10^{-8}$. In figura vengono riportate le funzioni d'onda per gli stati con $n = 0$ e $l = 0$.

Tabella 3.2: Oscillatore armonico con mappa, 4000 punti, $A = 30$

n	E_{n0}^{teo}	E_{n0}	δ_{rel}	E_{n1}^{teo}	E_{n1}	δ_{rel}
0	1.5	1.5	$9 \cdot 10^{-7}$	2.5	2.5	$7 \cdot 10^{-7}$
1	3.5	3.49999	$2.0 \cdot 10^{-6}$	4.5	4.49999	$1.6 \cdot 10^{-6}$
2	5.5	5.49998	$3.1 \cdot 10^{-6}$	6.5	6.49998	$2.6 \cdot 10^{-6}$
3	7.5	7.49997	$4.2 \cdot 10^{-6}$	8.5	8.49997	$3.7 \cdot 10^{-6}$
4	9.5	9.49995	$5.3 \cdot 10^{-6}$	10.5	10.49996	$4.5 \cdot 10^{-6}$

Tabella 3.3: Potenziale coulombiano con mappa, 4000 punti, $A = 30$

n	E_{n0}^{teo}	E_{n0}	δ_{rel}
0	-0.5	-0.499972	$6 \cdot 10^{-5}$
1	-0.125	-0.124998	$2.0 \cdot 10^{-5}$
2	-0.05556	-0.05556	$9.6 \cdot 10^{-5}$
3	-0.03125	-0.03091	$1 \cdot 10^{-2}$
4	-0.02	-0.01995	$2 \cdot 10^{-3}$

Figura 3.1: $R_{00}(r) = \frac{u_{00}(r)}{r}$ per l'oscillatore armonico tridimensionale con 4000 punti, $A=6$

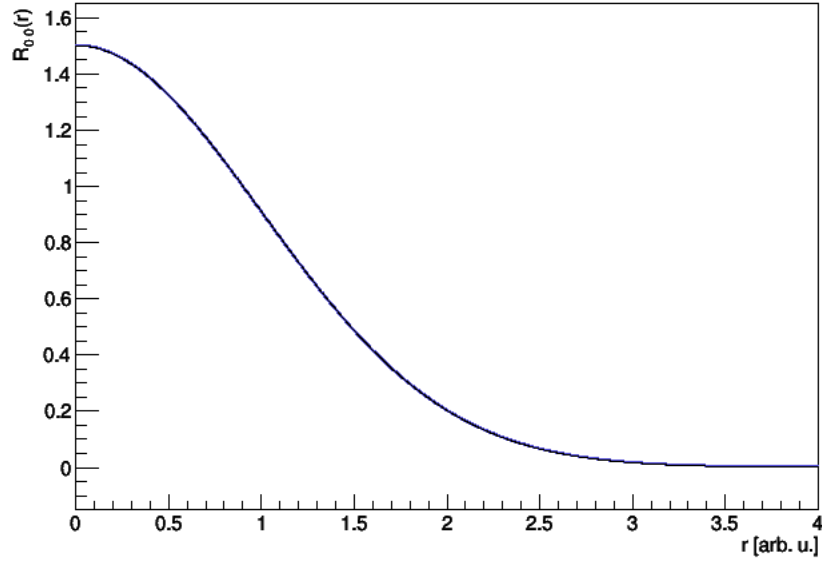
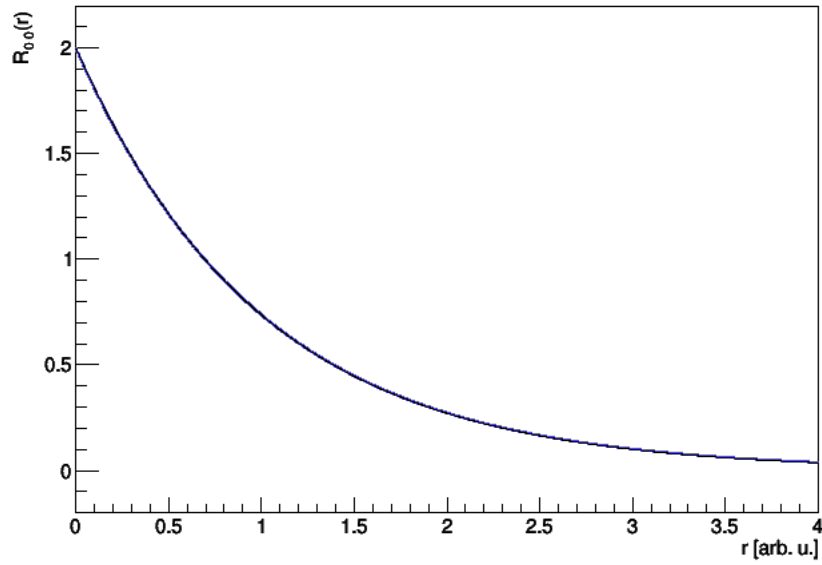


Figura 3.2: $R_{00}(r) = \frac{u_{00}(r)}{r}$ per il potenziale coulombiano con 4000 punti, $A=30$

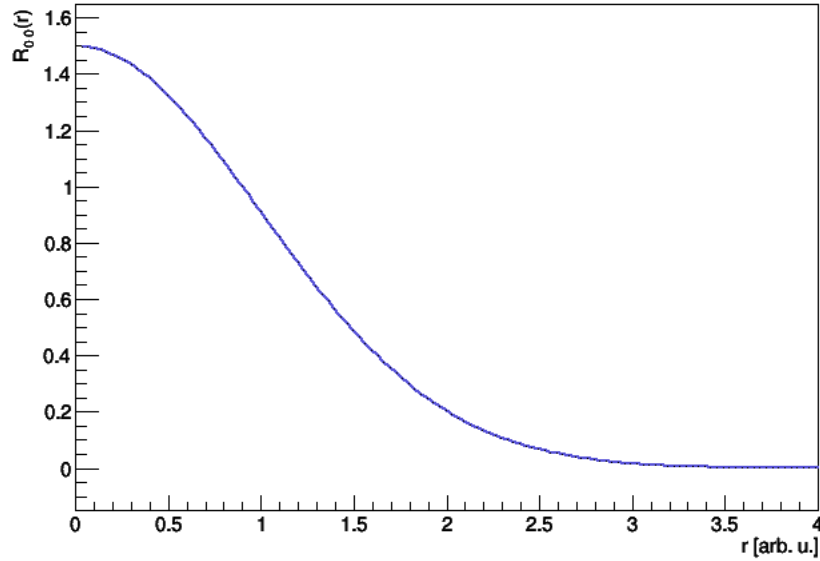


Data un'idea della precisione del programma nel caso di un reticolo con molti punti, riportiamo i dati relativi alle soluzioni dell'oscillatore armonico con la configurazione che useremo maggiormente per il programma HF, ossia un reticolo con $N = 300$ punti e $A = 5.0$.

Tabella 3.4: Oscillatore armonico con mappa, 300 punti, $A = 5$.

n	E_{n0}^{teo}	E_{n0}	δ_{rel}
0	1.5	1.4998	0.01%
1	3.5	3.4991	0.02%
2	5.5	5.4979	0.04%
3	7.5	7.4962	0.05%
4	9.5	9.4945	0.06%

Figura 3.3: $R_{00} = \frac{u_{00}(r)}{r}$ per l'oscillatore armonico con $N = 300$ punti e $A = 5.0$



3.4 Struttura generale del programma HF

Prima di passare al test del programma Hartree-Fock riportiamo uno schema sintetico che sarà approfondito in alcuni dettagli nei prossimi paragrafi. Le operazioni che svolge sono:

- prendere in avvio il numero di punti n , il parametro della mappa A , il numero di protoni e neutroni del nucleo che si vuole studiare;
- generare i reticoli s e r ;
- generare il laplaciano, la matrice del potenziale centrifugo, di Coulomb e Woods-Saxon;
- separatamente per protoni e neutroni, diagonalizzare la matrice H per i valori di j che il nucleo in questione richiede;
- riordinare i livelli energetici di singola particella ϵ_{nlj}^t trovati e le funzioni d'onda $\tilde{u}_{nlj}^t(s)$ associate;
- normalizzare le autofunzioni $\tilde{u}_{nlj}^t(s)$ e trasformarle in $u_{nlj}^t(r)$;
- generare le densità ρ e J e calcolare il numero di particelle e i raggi;
- generare le matrici associate al termine diretto e al termine di scambio e la nuova matrice H ;
- iterare i precedenti cinque punti finché la differenza massima tra gli autovalori al passo i e quelli al passo $i + 1$ non è minore di $\Delta\epsilon_{max} = 10^{-4} \text{ MeV}$ con la condizione che il numero di particelle sia preciso a meno di un errore di 10^{-4} .

3.5 Potenziale Woods-Saxon

Nella prima iterazione del programma Hartree-Fock dovremo dunque risolvere l'equazione di Schrödinger con un potenziale Woods-Saxon, per avere a disposizione autovalori e autofunzioni per la costruzione del termine diretto e di scambio descritti nel secondo capitolo. Di seguito descriviamo i risultati ottenuti dopo la prima iterazione usando un potenziale Woods-Saxon.

In questa fase il programma prende in entrata il numero di punti del reticolo n , il parametro della mappa A , il numero di neutroni e protoni. Una volta generato il reticolo, risolve separatamente per protoni e neutroni le equazioni di Schrödinger radiali

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{np}} \left(\nabla^2 - \frac{l_k(l_k + 1)}{r^2} \right) u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) + V^{WS}(r) u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) = \epsilon_{n_k l_k j_k}^{t_k} u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r)$$

per i valori di l attesi per il ground state del nucleo, e per $j = l \pm \frac{1}{2}$ quando $l \neq 0$. A queste equazioni sono associate delle equazioni matriciali come quelle descritte nel primo

capitolo. Trovati gli autovalori e le autofunzioni associate, il codice li riordina generando tre array destinati ai valori di ϵ_k , l_k , j_k e una matrice contenente le $u_k(r)$, per i livelli occupati, creando così uno schema di livelli di facile accesso. Fin qui i livelli, poiché non viene risolta la degenerazione su j_k , sono degeneri $2(2l_k + 1)$ volte.

A questo punto il programma genera le ρ_q , così da permettere la rielaborazione successiva all'interno di Hamiltoniane dipendenti dalle densità, mediante l'espressione

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{nljt} (2j+1) \left(\frac{u_{nlj}^t(r)}{r} \right)^2$$

ove la somma su t_k permette di trovare la forma di $\rho(r)$.

Una volta trovate le densità, sono le quantità integrali con esse calcolabili più facilmente ad interessarci: numero di particelle e raggi. Queste quantità permettono una facile verifica della consistenza dell'algoritmo e, assieme alla BE per nucleone e lo schema dei livelli, costituiranno il metro di paragone con altri algoritmi e/o dati sperimentali. Le due quantità sono calcolate come

$$N_t = 4\pi \int_0^\infty r^2 \rho_t(r) dr$$

$$\langle r_t^2 \rangle = \frac{4\pi}{N_t} \int_0^\infty r^4 \rho_t(r) dr.$$

Nelle tabelle successive riportiamo i confronti tra i dati ricavati dalla prima iterazione del nostro programma, indicato con (I), con quelli di un altro programma che risolve le equazioni differenziali tramite algoritmo di Numerov [11], che indicheremo con (II). I dati relativi al numero di particelle sono omessi dacché, a meno di alcune scelte errate del parametro A, sono quasi sempre esatti a meno di possibili errori $\epsilon_N \leq 10^{-5}$:

Tabella 3.5: Confronto raggi per alcuni nuclei con il programma (II) della referenza [11]

	^{12}C (I)	(II)	^{14}C (I)	(II)	^{48}Ca (I)	(II)	^{90}Zr (I)	(II)
$r_m[fm]$	2.512	2.512	2.575	2.576	3.554	3.554	4.229	4.230
r_n	2.512	2.512	2.669	2.669	3.722	3.722	4.074	4.075
r_p	2.512	2.512	2.445	2.446	3.305	3.305	4.349	4.350

Figura 3.4: Densità ^{14}C calcolata con potenziale Woods-Saxon

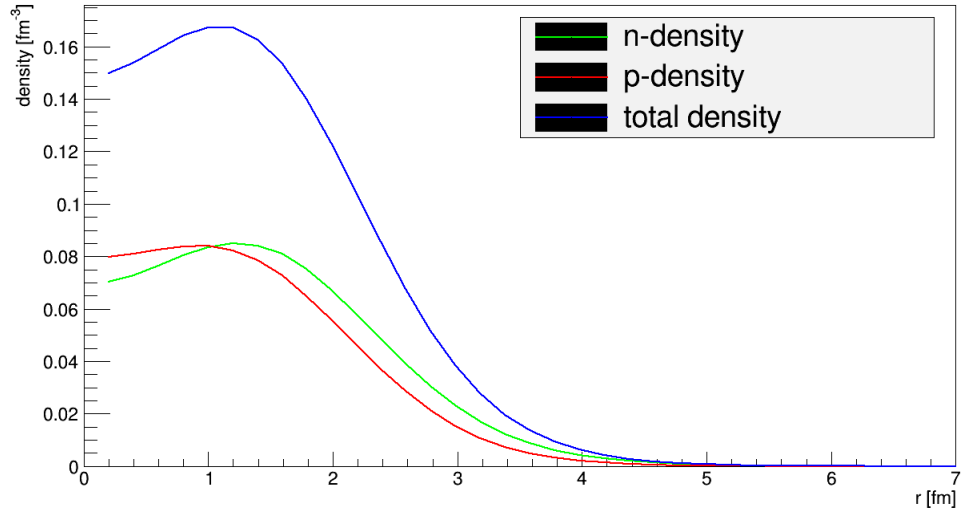


Figura 3.5: Densità ^{48}Ca calcolata con potenziale Woods-Saxon

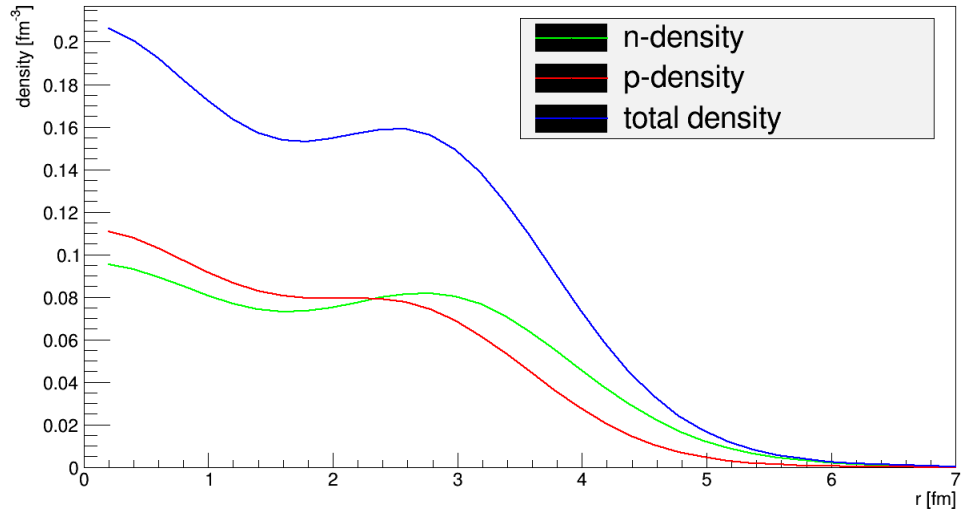


Tabella 3.6: confronto livelli energetici ^{48}Ca

	p (I) [MeV]	p (II) [MeV]	n (I) [MeV]	n (II) [MeV]
$s_{1/2}$	-45.200	-45.200	-35.015	-35.014
$p_{3/2}$	-35.499	-35.498	-26.031	-26.030
$p_{1/2}$	-35.499	-35.498	-26.031	-26.030
$d_{5/2}$	-24.619	-24.618	-16.048	-16.047
$d_{3/2}$	-24.619	-24.618	-16.048	-16.047
$s_{1/2}$	-22.45	-22.44	-14.258	-14.252
$f_{7/2}$	-	-	-5.577	-5.577

3.6 Skyrme

La seconda interazione, di cui abbiamo discusso nel capitolo precedente, è un'interazione di Skyrme semplificata, contenente solamente due termini, quello relativo al parametro $t_0 = -970,83 \text{ MeVfm}^3$ e quello a tre corpi relativo al parametro $t_3 = 16371,62 \text{ MeVfm}^6$. Come dedotto precedentemente, le nostre equazioni differenziali diventano in questo caso dipendenti dalle sole densità e da loro potenze, e per ogni stato di singola particella abbiamo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{np}} \left(\nabla^2 - \frac{l_k(l_k + 1)}{r^2} \right) u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) + U_{t_0-t_3}^{t_k}(r) u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) = \epsilon_{n_k l_k j_k}^{t_k} u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r)$$

$$U_{t_0-t_3}^{t_k}(r) = \left[\frac{t_0}{2} ((2 + x_0) \rho - (2x_0 + 1) \rho_{t_k}) + \frac{t_3}{24} ((5 + x_3) \rho^2 - 2(x_3 + 1) \rho_{t_k}^2) \right] \quad (3.2)$$

ove la densità ρ_{t_k} è la densità di protoni o di neutroni, in base al valore di isospin della particella k -esima. Finita dunque la prima iterazione con il potenziale Woods-Saxon, il programma genera le densità per protoni e neutroni e quella totale, riscrive la matrice $U_{t_0-t_3}$ seguendo la formula (9) per ogni valore di l_k , j_k e t_k , diagonalizzando la matrice hamiltoniana totale. I risultati vengono riordinati come descritto per il caso Woods-Saxon, e le nuove densità vengono generate. Il procedimento è iterato fino a raggiungere la condizione di convergenza. Finite le iterazioni vengono calcolati i raggi e l'energia di legame nella forma

$$E = \frac{1}{2} \sum_k (T_k + \epsilon_k) - \frac{1}{2} E_r$$

con k ad indicare lo stato occupato. Per calcolare tale quantità si esegue con la formula dei trapezi il calcolo dell'integrale

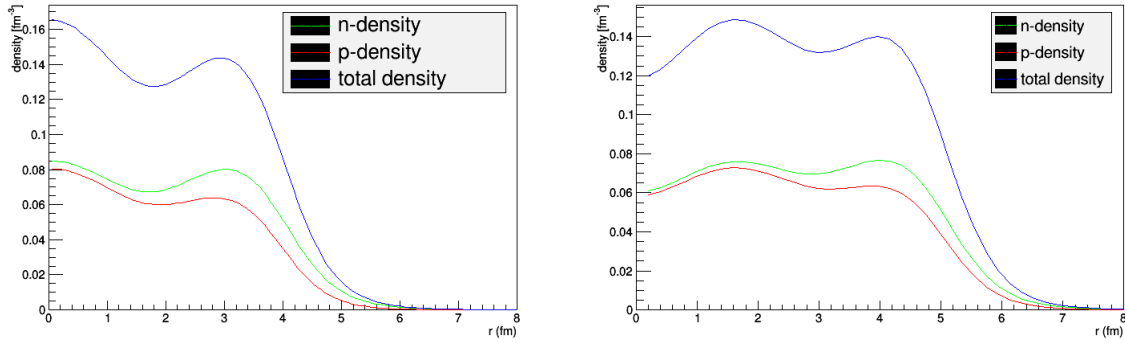
$$T_k = \left\langle k \left| \frac{p_k^2}{2m_{t_k}} \right| k \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m_{t_k}} \int_0^\infty dr \left[(u_k(r) u_k''(r)) - l_k(l_k + 1) \frac{u_k^2(r)}{r^2} \right]$$

generando una matrice per le derivate seconde discretizzate che agirà sulle funzioni d'onda di ogni livello per il calcolo dell'energia cinetica di singola particella. Infine verrà calcolato l'integrale del termine di riarrangiamento come

$$E_r = \frac{t_3}{6} \pi \int_0^\infty r^2 dr [(1 - x_3) \rho^3 + (4x_3 + 2) \rho_n \rho_p \rho].$$

Le densità per il ^{48}Ca e il ^{90}Zr una volta raggiunta la convergenza su un reticolo di 200 punti con parametro $A = 15 \text{ fm}$ hanno la forma riportata in figura.

Figura 3.6: densità dei nuclei di ^{48}Ca e ^{90}Zr con interazione $t_0 - t_3$



Il paragone con l'algoritmo HF+RPA(II) è fatto confrontando livelli energetici, raggi ed energie di legame: nelle seguenti tabelle riportiamo alcuni significativi casi.

Tabella 3.7: Paragone raggi e B.E. per particella tra il programma (I) e il programma (II)

	^{12}C (I)	(II)	^{14}C (I)	(II)	^{48}Ca (I)	(II)	^{90}Zr (I)	(II)
$r_{tot}[\text{fm}]$	2.450	2.450	2.524	2.524	3.600	3.600	4.340	4.341
r_n	2.450	2.450	2.450	2.451	3.690	3.691	4.404	4.405
r_p	2.450	2.450	2.578	2.578	3.469	3.469	4.259	4.259
$E/A[\text{MeV}]$	-5.112	-5.108	-6.000	-5.997	-7.308	-7.305	-8.165	-8.159

Tabella 3.8: Paragone Livelli Energetici ^{48}Ca e ^{14}C

	^{14}C (I)	(II)	(I)	(II)	^{48}Ca (I)	(II)	(I)	(II)
	$p [\text{MeV}]$	$p [\text{MeV}]$	$n [\text{MeV}]$	$n [\text{MeV}]$	$p [\text{MeV}]$	$p [\text{MeV}]$	$n [\text{MeV}]$	$n [\text{MeV}]$
$s_{\frac{1}{2}}$	-29.131	-29.127	-24.685	-24.696	-37.013	-37.020	-32.268	-32.259
$p_{\frac{3}{2}}$	-15.367	-15.358	-11.236	-11.234	-29.779	-29.786	-24.259	-24.247
$p_{\frac{1}{2}}$	—	—	-11.236	-11.234	-29.779	-29.786	-24.259	-24.247
$d_{\frac{5}{2}}$	—	—	—	—	-20.570	-20.579	-14.822	-14.809
$d_{\frac{3}{2}}$	—	—	—	—	-20.570	-20.579	-14.822	-14.809
$s_{\frac{1}{2}}$	—	—	—	—	-15.847	-15.847	-11.927	-11.903
$f_{\frac{7}{2}}$	—	—	—	—	—	—	-4.3449	-4.3304

Dal punto di vista più strettamente numerico si può concludere, da un rapido confronto tra i dati riportati, che i risultati sono molto simili tra i due programmi, e che l'efficienza numerica del programma è buona, nonostante presenti problemi di convergenza per nuclei molto asimmetrici come nel caso del ^{208}Pb : in questo caso, infatti, l'ultimo livello occupato si inverte ad ogni iterazione con un altro livello molto vicino in energia ma associato ad un differente autovalore del momento angolare, facendo variare la forma funzionale della densità, non permettendo, in ultima analisi, la convergenza. Probabilmente la presenza di un'interazione spin-orbita che risolva le degenerazioni dei livelli energetici potrebbe risolvere questo problema. Inoltre l'algoritmo è lento se paragonato ad un algoritmo di risoluzione di equazioni differenziali, poiché associato alla diagonalizzazione di una matrice la cui dimensione è il quadrato del numero di punti del reticolo.

Dal punto di vista fisico è interessante notare come con un'interazione così semplice, che tiene conto solo di un termine centrale e di un termine a tre corpi ma parametrizzata con proprietà dei nuclei finiti, si riesca a riprodurre la saturazione nucleare e trovare buone stime per i raggi nucleari e per le energie di legame, per nuclei vicini alla simmetria.

Capitolo 4

Risultati

In questo capitolo ci proponiamo di mostrare i risultati ottenuti con il nostro programma in simmetria sferica. In particolare nella sezione 4.1 mostreremo i dettagli sulla struttura del programma e alcuni paragoni con altri due codici che usano altre strategie per la soluzione delle equazioni HF, nella sezione 4.2 mostreremo dei confronti dettagliati con uno di questi e dei paragoni con dati sperimentali, mentre nella sezione 4.3 mostreremo dei risultati originali. Come già evidenziato lo scopo principale di questo lavoro è scrivere un programma che risolva le equazioni HF nello spazio delle coordinate per studiare nuclei debolmente legati. Un caso interessante a questo proposito è costituito dalla catena isotopica dell'elio, poiché in questa è possibile con soli due protoni raggiungere nuclei molto ricchi di neutroni e debolmente legati.

4.1 Dettagli sull'implementazione e test

Come già detto (Cap. 2), con un'interazione a range finito all'equazione di Hartree-Fock è associato un insieme di equazioni di singola particella che hanno la struttura di un'equazione di Schrödinger non-locale, ed avendo visto nel terzo capitolo come al termine di scambio, ovvero il potenziale non locale, sia associata una matrice con elementi non nulli fuori diagonale, si deduce come sia in questo caso che le caratteristiche salienti di questo programma entrano in gioco.

Di seguito presentiamo la struttura del programma e i risultati ottenuti con l'interazione di Gogny D1 [4] di cui useremo la forma dell'interazione, considerando tutti i termini presenti, e i parametri. Vengono anche presentati i paragoni con altri due programmi, l'originale di

Gogny su una base di oscillatore armonico [4] e un programma che sfrutta la teoria LDA (*local density approximation*) per ottenere un termine di scambio locale, come in [18].

Poiché sarà introdotta esattamente l'interazione spin-orbita, per calcolare le funzioni di prova introdurremo, per la prima interazione, il potenziale Woods-Saxon completo della parte spin-orbita che comprende il termine

$$V_{ls}(r) = V_{0ls} (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) r_0^2 \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r).$$

Qui $f(r)$ è la funzione di Fermi presente anche nel potenziale Woods-Saxon centrale, e l'unico parametro aggiuntivo è $V_{0ls} = 0.44V_0$ [5].

Finita l'iterazione iniziale con il potenziale Woods-Saxon appena menzionato, il programma genera lo schema dei livelli e le densità e, per ogni valore di t_k, l_k, j_k , con k che rappresenta l'indice del livello della particella singola, finché la convergenza non viene raggiunta, risolve l'equazione per la funzione d'onda $u_k(r)$

$$\left(-K_{CM} \frac{\hbar^2}{2m_{np}} \left(\nabla^2 - \frac{l_k(l_k + 1)}{r^2} \right) + U_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) + \delta_{t_k, \frac{1}{2}} V_c(r) + W_{ls}^{t_k}(r) + U_{t_3}^{t_k}(r) \right) u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) +$$

$$-F_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r) = E_{n_k l_k j_k}^{t_k} u_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r)$$

dove il potenziale di Hartree $U_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r)$ e quello di Fock non-locale $F_{n_k l_k j_k}^{t_k}(r)$ hanno la forma che si può vedere in [16] e mostrata in dettaglio nel secondo capitolo per l'interazione di Gogny, mentre il termine a tre corpi e il termine spin-orbita locale di tipo Skyrme (come nell'articolo di Gogny [4]) sono rispettivamente

$$U_{t_3}^{t_k}(r) = \frac{t_3}{2} \rho^{-\frac{2}{3}} (\rho_{-t_k} \rho_{t_k} + 3\rho \rho_{-t_k})$$

$$W_{ls}^{t_k}(r) = W_0 \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (\rho(r) + \rho_{t_k}(r)) \langle j_k l_k || \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} || j_k l_k \rangle - \left(\frac{1}{r} + \frac{d}{dr} \right) (J(r) + J^{t_k}(r)) \right]$$

in cui abbiamo dovuto introdurre la densità di spin J^t trattata nel secondo capitolo

$$J^t = \frac{1}{2\pi r^2} \sum_z (2j_z + 1) \langle j_z l_z || \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} || j_z l_z \rangle \left(u_{n_z j_z l_z}^{t_z}(r) \right)^2$$

La struttura del programma in questo caso include l'introduzione di un potenziale coulombiano diretto per i protoni V_c , che rappresenta il potenziale generato da una sfera

uniformemente carica [5] di raggio $R_c = 1.2 \cdot A^{\frac{1}{3}}$ fm. Il termine coulombiano di scambio viene trascurato, potendo essere irrilevante per nuclei molto leggeri e dell'ordine del 10% in nuclei come il ^{208}Pb . Possiamo anticipare che queste costituiranno uno degli effetti principali che produrranno discrepanze nei risultati rispetto ad altri programmi in cui il termine coulombiano direttamente è trattato esattamente e quello di scambio in approssimazione locale.

Abbiamo inoltre introdotto il fattore $K_{CM} = (1 - \frac{1}{A})$ di correzione del centro di massa ad un corpo. Il termine a due corpi di tale correzione è stato trascurato così come in [18].

Se si volesse usare l'approssimazione perturbativa al primo ordine per il termine spin-orbita si sottostimerebbero troppo i raggi nucleari, poiché tale approssimazione non apporta correzioni alle funzioni d'onda ma solo agli autovalori.

Si decide dunque di introdurre il termine spin-orbita esattamente: l'unico accorgimento in questo caso è legato alla riscrittura delle derivate prime col metodo delle differenze finite, per questo utilizzeremo il metodo più preciso e immediato, quello della differenza finita centrata in cui l'incremento è $\Delta_0 f(x) = f(x + \frac{h}{2}) - f(x - \frac{h}{2})$ e il rapporto incrementale è $\frac{\Delta_0 f(x)}{h}$.

L'unica osservabile la cui struttura cambia forma è l'energia di riarrangiamento E_R , poiché il termine a tre corpi ha una dipendenza dalla densità diversa rispetto a quella trattata finora, e, come si può vedere in [12] si ottiene

$$E_R = t_3 \pi \int r^2 dr \rho^{-\frac{1}{3}} (\rho^2 - (\rho_n^2 + \rho_p^2))$$

I tempi di computazione associati a questo nuovo schema sono leggermente più lunghi dei precedenti casi, in quanto le matrici da trattare hanno una struttura più complessa e la loro scrittura e diagonalizzazione richiede più tempo, per questo motivo limiteremo la nostra analisi a nuclei piccoli analizzabili già con $N = 200$ punti nel reticolo rimappato.

Di seguito riportiamo, per il nucleo di ^{16}O il paragone con entrambi i programmi dei raggi nucleari e dell'energia di legame di particella singola.

Tabella 4.1: Paragone tra il nostro programma (I), il programma di Gogny (II), e il programma della referenza [18] (III) per ^{16}O

^{16}O	(I)	(II)	(III)
$r_{tot}[fm]$	2.59	2.64	2.65
r_n	2.58	2.63	2.64
r_p	2.60	2.65	2.66
$E/A[MeV]$	-8.6	-8.1	-7.8

Si può notare come le energie di legame siano diverse per (I) e (II), come in (I) si ritrovi un sistema fortemente legato, mentre per (III) un sistema meno legato.

I raggi nucleari risultano più piccoli per il programma (I) coerentemente con il fatto che il nucleo sia più legato. A questo proposito ricordiamo che i tre programmi sfruttano tre strategie diverse e che la differenza tra (I) e (II) è che (I) risolve le equazioni nello spazio reale partendo dalla soluzione di un potenziale Woods-Saxon, mentre (II) lavora su una base di funzioni d'onda di oscillatore armonico e i parametri sono estratti da un fit in base ai suoi risultati. Inoltre l'utilizzo di una interazione di Coulomb non esatta in (I) si ripercuote direttamente sulla densità ρ_p e dunque indirettamente su r_p e sulla ρ totale.

Altre ragioni di queste differenze saranno oggetto di ulteriori analisi. Tuttavia è importante sottolineare come sia stato possibile compiere un paragone dettagliato che ha permesso un test della parte di spin-orbita. Questo ulteriore paragone tra (I) e (II) è quello tra gli splitting $\Delta = (E_{p_{3/2}} - E_{p_{1/2}})$ ottenuti per i neutroni dello stesso nucleo: qui si trova un accordo ottimale tra $\Delta^{(I)} = 6.03 \text{ MeV}$ e $\Delta^{(II)} = 6.00 \text{ MeV}$.

In tabella riportiamo un confronto dettagliato per i livelli di singola particella ottenuti con il programma (I) e (III).

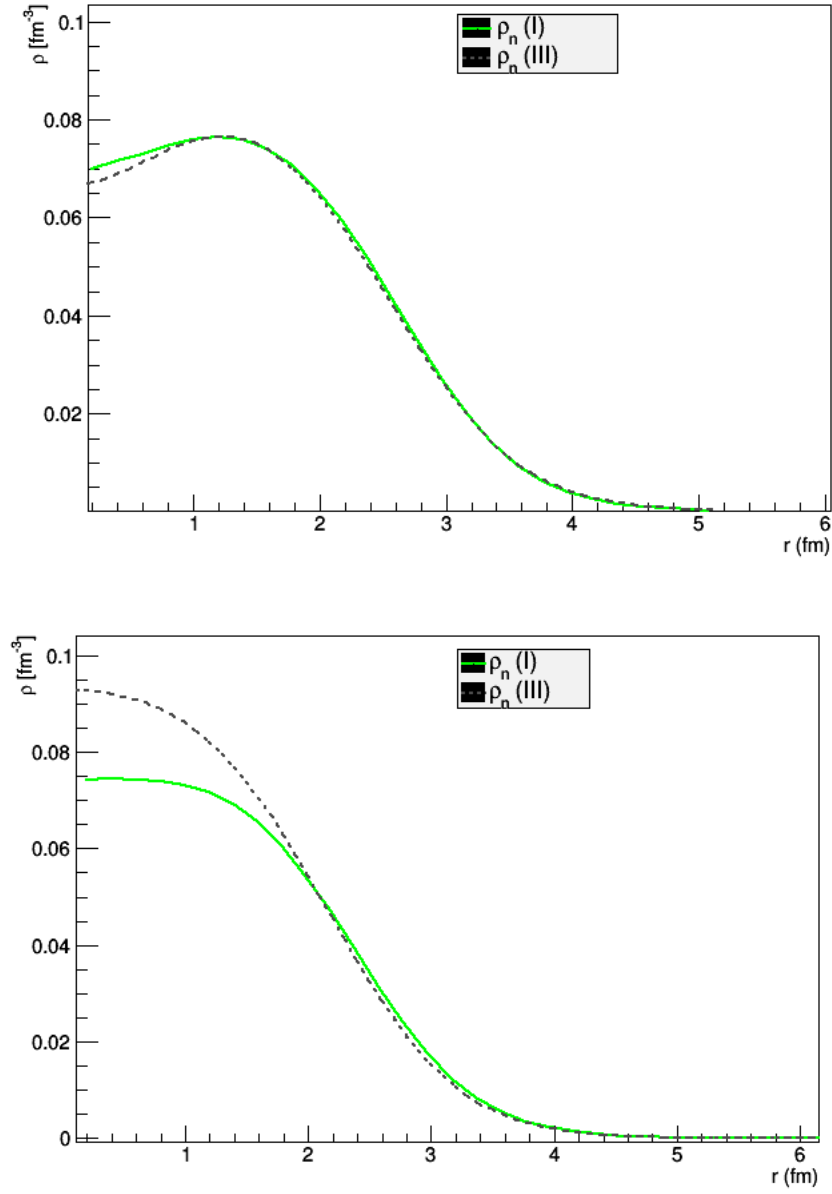
Tabella 4.2: Schemi dei livelli per ^{16}O e ^{12}C ottenuti con (I) e (III)

^{16}O	p (I) [MeV]	p (III) [MeV]	n (I) [MeV]	n (III) [MeV]
$s_{1/2}$	-35.2735	-33.984	-39.662	-37.655
$p_{3/2}$	-18.433	-17.531	-22.590	-21.005
$p_{1/2}$	-12.951	-11.938	-16.981	-15.310
^{12}C	p (I) [MeV]	p (III) [MeV]	n (I) [MeV]	n (III) [MeV]
$s_{1/2}$	-31.314	-32.844	-34.578	-35.848
$p_{3/2}$	-16.6155	-14.012	-19.790	-16.768

Nelle seguenti figure vengono riportati dei confronti tra le densità neutroniche ottenute con

(I) e (III).

Figura 4.1: Densità dei neutroni per ^{16}O (sopra) e ^{12}C (sotto) ottenute con (I) e (III)



4.2 Elio-4

Nel seguito sono riportati i principali risultati del nostro programma con l'interazione di Gogny D1. Poiché si dispone del programma (III), varie quantità sono messe a confronto per il nucleo di ${}^4\text{He}$. Il programma (III) tiene conto dell'interazione coulombiana sia con un termine diretto che con un termine di scambio, a differenza del programma (I) che sfrutta l'approssimazione di sfera carica descritta in precedenza. Un dettagliato confronto, riportato nella tabella a seguire, ci mostra come questa approssimazione sia valida anche per un nucleo così piccolo. Il termine di scambio e diretto dell'interazione coulombiana in (III) si combinano a dare un termine in accordo qualitativo con il nostro. Nelle tabelle 4.4 e 4.5 sono invece riportati i dati ottenuti e gli scarti percentuali per alcune proprietà nucleari del ${}^4\text{He}$ ottenute con (I) e (III) e confrontate tra loro e con i dati sperimentali disponibili [22]. Si può notare come l'accordo tra i dati (I) e (III) sia buono. L'accordo con i dati sperimentali è discreto per i raggi, buono per le energie, considerando che stiamo applicando il campo medio a nuclei molto piccoli. Ci si aspetterebbe infatti che l'approssimazione di campo medio sia affidabile per nuclei medio-grandi, mentre è molto interessante notare come risulti discreta già per un nucleo con così pochi costituenti.

Tabella 4.3: Confronto energie coulombiane ottenute con il programma (I) e (III) per il nucleo ${}^4\text{He}$: rispettivamente vengono riportate l'energia coulombiana del programma (I), le energie del programma (III) ottenute considerando il termine diretto e di scambio e il solo termine diretto

	$E_{coul}(I)$	$E_{coul}^{tot} (III)$	$E_{coul}^{dir.} (III)$
[MeV]	0.715	0.850	1.481

Tabella 4.4: Confronti raggi nucleari, BE, Energie cinetiche totali E_{cin} , BE/A tra (I) e (III)

	${}^4\text{He}$ (I)	(III)	$\delta_{\%}^{(I)-(III)}$	exp.	$\delta_{\%}^{(I)-exp}$
r_{tot} [fm]	1.87	1.89	1.0%	-	-
r_n	1.86	1.89	1.6%	-	-
r_p	1.87	1.90	1.6%	1.68	11.3%
E [MeV]	-28.87	-28.58	1.0%	-28.30	2.0%
E_{cin}	40.67	39.37	1.6%	-	-
E/A	-7.22	-7.14	1.2%	-7.07	2.1%

Tabella 4.5: Energia degli stati 1s di protone e neutrone per ${}^4\text{He}$, con (I) e (III)

	(I) [MeV]	(III) [MeV]
p	-18.40	-17.62
n	-19.78	-18.63

4.3 Catena isotopica dell'Elio

Il discreto accordo con i dati sperimentali per il nucleo di ${}^4\text{He}$ e la possibilità di svolgere rapidamente calcoli HF ci portano ad affrontare uno studio sistematico di isotopi pari-pari ${}^4\text{He}$, ${}^6\text{He}$, ${}^8\text{He}$, ${}^{10}\text{He}$.

Questa catena isotopica, oltre a presentare un mero vantaggio computazionale, costituisce un ottimo banco di prova per il nostro programma e permette di affrontare molti aspetti della teoria sinora studiata e saggiare i limiti della sua applicabilità. In essa sono infatti presenti: un nucleo particolarmente legato e stabile come il ${}^4\text{He}$; un nucleo debolmente legato, ai limiti della *neutron drip-line*, e altamente instabile come il ${}^{10}\text{He}$ ($t_{\frac{1}{2}} = 2.10 \cdot 10^{-21}\text{sec}$) per cui sono disponibili pochi dati sperimentali e che presenta una grande asimmetria tra protoni e neutroni; due nuclei instabili per decadimento β che inoltre presentano *halo* (vedi giù) come ${}^8\text{He}$ ($t_{\frac{1}{2}} = 119 \cdot 10^{-3}\text{sec}$) e ${}^6\text{He}$ ($t_{\frac{1}{2}} = 807 \cdot 10^{-3}\text{sec}$), per i quali sono disponibili le misure dei raggi di carica misurati per la prima volta in [22] e [23].

I cosiddetti nuclei *halo* sono nuclei debolmente legati ai limiti della stabilità nucleare che presentano funzioni d'onda estese, a causa della bassa energia di legame dei nucleoni. Nel linguaggio del modello a particelle indipendenti si può dire che in tali nuclei parte dei neutroni occupano livelli di particella singola molto vicini al continuo. Per il ${}^6\text{He}$, ad esempio, due neutroni sono debolmente legati e la loro funzione d'onda ha un andamento asintotico che decresce meno rapidamente di quanto non avvenga nel ${}^4\text{He}$, formando appunto la struttura *halo*.

L'instabilità degli ultimi tre isotopi della catena in considerazione rende sperimentalmente difficile lo studio delle loro proprietà. Tuttavia esperimenti basati su spettroscopia laser di singoli atomi di elio raffreddati e confinati in trappole magneto-ottiche [22][23] hanno permesso di ottenere misure per i raggi di carica che sono rispettivamente per ${}^6\text{He}$ e ${}^8\text{He}$ $r_c = 2.07\text{ fm}$ e $r_c = 1.93\text{ fm}$.

Lo studio tramite il nostro programma di questa catena isotopica riproduce perfettamente il limite di stabilità nucleare. I nuclei fino al ${}^{10}\text{He}$ sono legati e i successivi slegati, così come osservato sperimentalmente. Nella tabella seguente riportiamo i confronti tra le energie di legame ottenute con il nostro programma per i nuclei della catena isotopica e i dati sperimentali.

Tabella 4.6: Paragone BE/A di 4He , 6He , 8He , ${}^{10}He$ calcolati con (I) e confronto con i dati sperimentali

	BE/A [MeV] (I)	BE/A [MeV] (exp.)	$\delta_{\%}^{(I)-exp}$
4He	7.22	7.07	2.1%
6He	7.21	4.88	47.7%
8He	4.16	3.92	6.1%
${}^{10}He$	3.38	3.00	12.6%

L'accordo con i dati sperimentali per quanto riguarda i tre nuclei con shell chiuse è buono, mentre per il nucleo 6He che presenta la shell $p_{3/2}$ incompleta, come ci si aspettava, il calcolo non è accurato. Questo è un esempio di limite di validità del nostro approccio in cui le correlazioni di pairing attive in nuclei a shell aperte sono state trascurate.

Per quanto riguarda lo studio dei raggi quadratici medi il confronto con i dati sperimentali può essere fatto solo per i raggi di carica e non è presente ad oggi una misura di questa quantità nel caso del nucleo ${}^{10}He$. La presenza nei nuclei *halo* con eccesso neutronico di una densità neutronica più estesa e diffusa della densità protonica (*neutron skin*) può essere quantificata utilizzando la quantità $\Delta r = r_p - r_n$ (*neutron skin thickness*).

Tabella 4.7: Raggi nucleari dei nuclei della catena isotopica calcolati con (I) e paragoni con i dati sperimentali

	r_n [fm] (I)	r_p [fm] (I)	r_p [fm] (exp.)	$\delta_{\%}^{(I)-exp}$	Δr [fm]
4He	1.86	1.87	1.68	11.3%	0.01
6He	2.32	1.90	2.068	8.0%	0.42
8He	2.59	1.99	1.933	3.1%	0.60
${}^{10}He$	2.94	2.04	-	-	0.90

L'accordo con i dati sperimentali è discreto per i primi due nuclei, buono per quanto riguarda il nucleo 8He . Tuttavia non si può riprodurre l'andamento non monotono del raggio di carica.

Nel caso del 8He , in particolare, un livello debolmente legato è occupato dagli ultimi neutroni che risultano dunque avere una funzione d'onda che si annulla a distanze maggiori

rispetto ai precedenti casi. Un caso straordinariamente poco legato è associato al ^{10}He con il livello degli ultimi due neutroni legati con $E_{p_{1/2}} = -1.78384$ MeV.

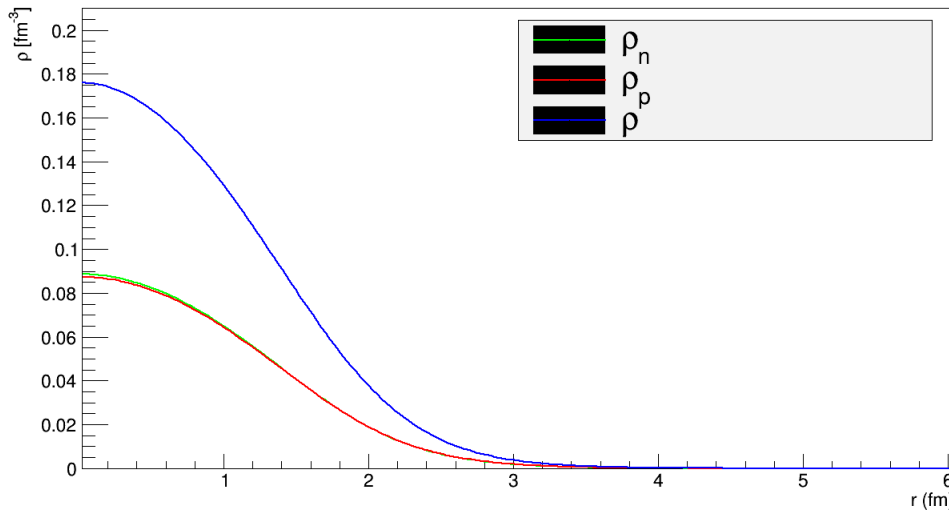
Nelle figure successive riportiamo i risultati relativi alle densità nucleari dei nuclei della catena isotopica in esame. Non ci sono dati sperimentali con cui confrontare le densità dei neutroni.

Inoltre ci si aspetta un maggiore sparpagliamento della densità neutronica e una crescita delle code della distribuzione all'aumentare del numero di neutroni nel nucleo.

Tabella 4.8: Raggi nucleari di ^6He e ^8He calcolati con (I) e scarto percentuale

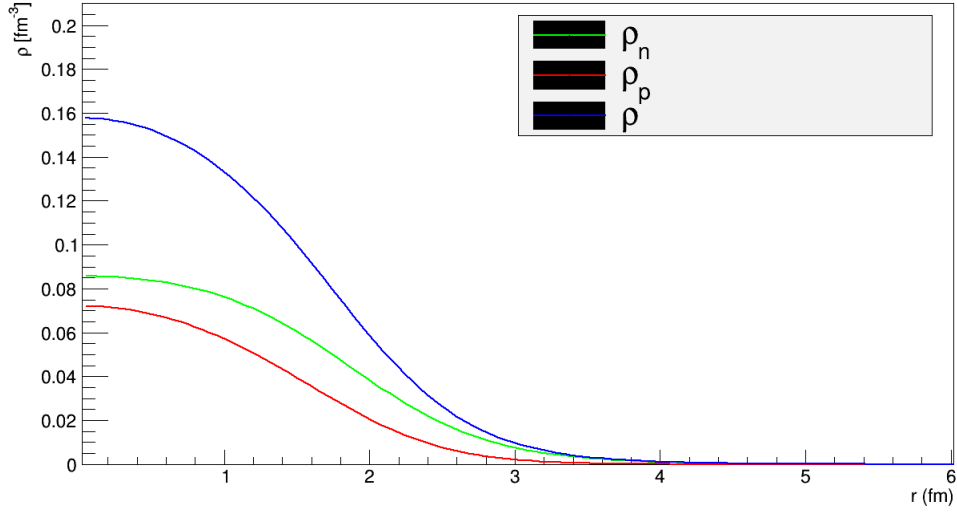
	r_p [fm] (I)	r_p [fm] (exp.)	$\delta_{\%}^{(I)-exp}$
^6He	1.902	2.068	8.0%
^8He	1.994	1.933	3.1%

Figura 4.2: Densità ^4He



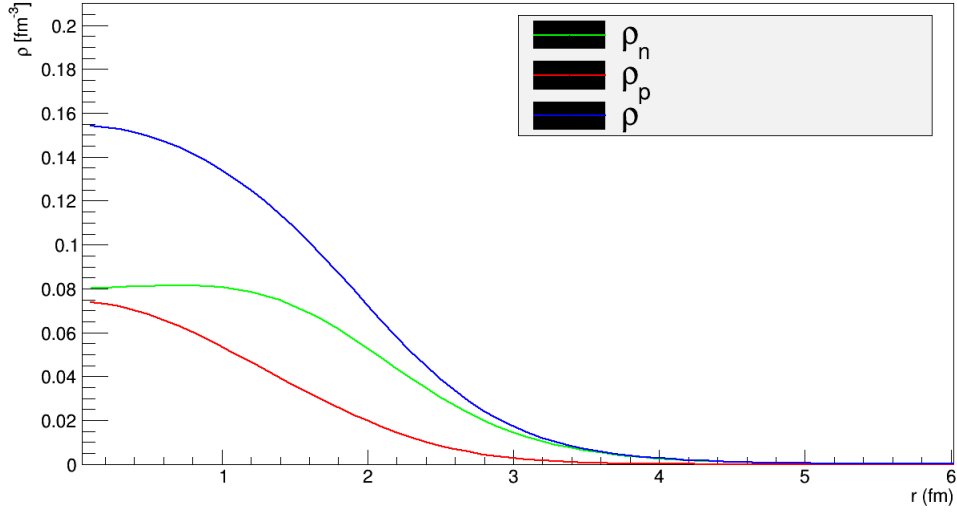
Il nucleo di ^4He presenta un solo stato occupato e una densità centrale molto piccata. Ci si aspetterebbe dunque che questo tipo di nucleo non sia trattabile con metodi di campo medio autoconsistente, mentre i risultati per le due grandezze studiate (BE/A e raggio di carica) risultano in discreto accordo con i dati sperimentali.

Figura 4.3: Densità ${}^6\text{He}$



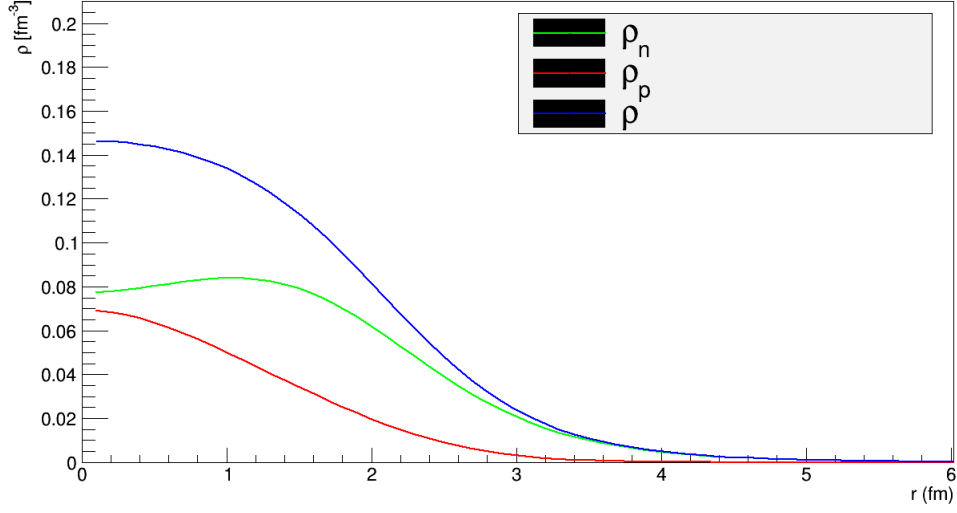
Nel ${}^6\text{He}$ si può notare come le code della distribuzione dei neutroni si annullino più lentamente del caso del ${}^4\text{He}$ al crescere della distanza (questo si può infatti confrontare con il dato relativo alla *neutron skin thickness*). Ciò è dovuto al fatto che due neutroni occupano, nello schema di particelle indipendenti, una shell $p_{3/2}$ con energia $E_{p_{3/2}} = -6.97$ MeV. In questo nucleo l'andamento atteso per cui al crescere del numero di neutroni nel nucleo corrispondano energie di singola particella per i protoni sempre più basse è rispettato.

Figura 4.4: Densità ${}^8\text{He}$



Nel ${}^8\text{He}$ i quattro neutroni *halo* occupano la shell $p_{3/2}$. Tale livello ha un'energia di legame $E_{p_{3/2}} = -6.12$ MeV, dunque in modulo minore rispetto al caso del ${}^6\text{He}$. Questo giustifica la crescita delle code della distribuzione dei neutroni. Inoltre si può notare come la densità totale assuma un valore via via minore in $r = 0$ fm, proprio per via del maggiore sparpagliamento dei neutroni.

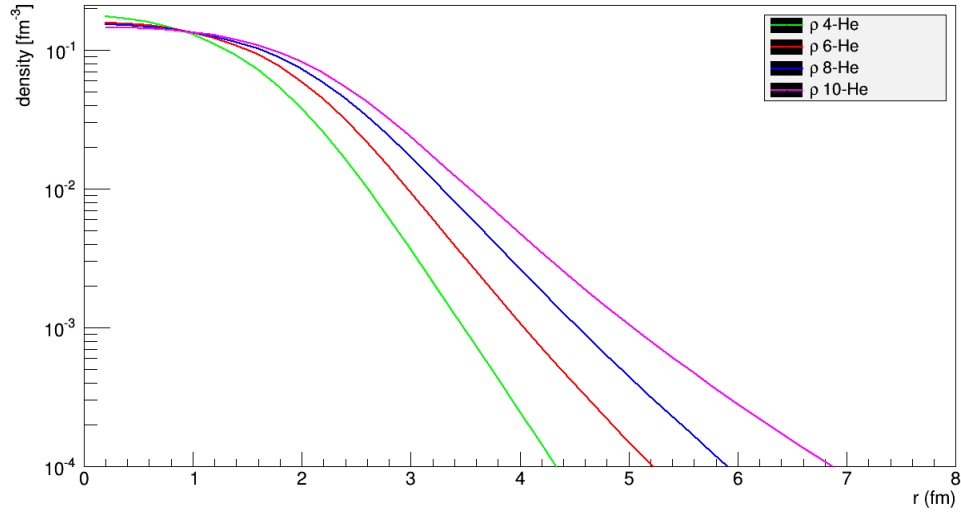
Figura 4.5: Densità ^{10}He



Il caso del ^{10}He è particolarmente interessante: due neutroni, oltre i neutroni che componevano la *halo* dei due precedenti nuclei, occupano una shell molto debolmente legata $p_{1/2}$ con energia $E_{p_{1/2}} = -1.78$ MeV. Questo livello molto vicino al continuo è la causa della maggiore diffusione della distribuzione dei neutroni. La *neutron skin thickness* assume in questo caso un valore che è $\Delta r = 0.90$ fm, maggiore del doppio rispetto al nucleo ^6He .

Un confronto quantitativo più dettagliato dell'andamento delle code delle densità totali dei quattro diversi isotopi si può ottenere in un grafico semilogaritmico (Log-lin) come riportato nella figura seguente. Ci si aspetta che l'andamento asintotico delle funzioni d'onda per $r \rightarrow \infty$ sia l'inverso di un esponenziale, $u(r) \sim \exp(-kr)$, ovvero l'andamento che una funzione d'onda assume fuori da una buca di potenziale quadrata. Questo k è legato alla radice dell'energia del livello, e diminuisce via via che ci si avvicina a stati prossimi al continuo.

Figura 4.6: Densità totali dei quattro diversi isotopi in un grafico semilogaritmico



Le rette che vediamo in questa figura rappresentano le code delle distribuzioni. Queste, come anticipato, hanno un andamento esponenziale, e dunque in un grafico semi logaritmico, sono delle rette con coefficiente negativo. Questo coefficiente è proprio il k sopra menzionato: si può infatti notare come esso diminuisca in valore assoluto all'aumentare dei neutroni presenti nell'isotopo.

Capitolo 5

Conclusioni

Il metodo di campo medio autoconsistente per lo studio dei sistemi nucleari è costituito dall'uso di interazioni efficaci con parametri fittati fenomenologicamente. Questo approccio ha il vantaggio di garantire buone stime per osservabili nucleari di nuclei (stabili e non) con un carico numerico ridotto. Lo scopo del presente lavoro è stato sfruttare tale metodo per lo studio delle proprietà del *ground state* di nuclei sferici pari-pari con un'interazione a range finito. Le interazioni di Skyrme e Gogny sono state studiate e le equazioni di singola particella sono state dedotte nel caso menzionato di nuclei pari-pari sferici.

I programmi sviluppati finora per l'interazione di Skyrme, nello spazio reale, sono molto performanti ed utilizzati poiché l'interazione a range zero rende le equazioni di Schrödinger nell'approssimazione HF delle equazioni differenziali.

La seconda interazione, quella di Gogny, a differenza dell'interazione di Skyrme, è a range finito e in essa non si presenta la necessità di dover simulare la non-località dell'interazione tra nucleoni, come invece avviene con l'equazione di Skyrme, aggiungendo termini dipendenti dal momento. Le equazioni HF associate a tale tipo di interazione sono integro-differenziali poiché compare al loro interno un potenziale non locale di scambio, dovuto alla natura fermionica delle particelle in esame. La maggior parte dei programmi per questo tipo di interazioni funziona su una base di funzioni d'onda tipicamente di oscillatore armonico, o sfruttando un'approssimazione per rendere locale il termine di scambio (LDA). La base di funzioni di oscillatore armonico non è tuttavia adatta a descrivere accuratamente nuclei debolmente legati, mentre l'approccio LDA ha lo svantaggio di non trattare esattamente il termine non locale di scambio.

Risolvere le equazioni HF ha richiesto la scrittura di un programma di calcolo nello spazio reale che sfruttasse un'approssimazione delle equazioni integro-differenziali su reticolo rea-

le. Il programma risolve dunque un insieme di equazioni matriciali.

Per fare questo abbiamo in particolare sfruttato due diversi metodi, il primo e più intuitivo sfrutta un reticolo a passo costante, mentre il secondo sfrutta una rimappatura del reticolo per tenere conto dei contributi asintotici dei potenziali. Quest'ultimo metodo ha richiesto l'introduzione di varie correzioni che sono state presentate e discusse nel terzo capitolo.

Il programma scritto è risultato efficiente sia per la soluzione di equazioni differenziali con potenziali di oscillatore armonico, coulombiano e Woods-Saxon e nel caso delle equazioni Skyrme-HF, sia per la soluzione di equazioni integrodifferenziali ed è, in linea di principio, utilizzabile nel contesto di calcoli HF in altri contesti fisici, cambiando il potenziale di interazione.

L'utilizzo dell'interazione di Gogny all'interno del programma è ancora in fase di sviluppo, tuttavia è stato possibile applicarla a nuclei di dimensioni piccole quali ${}^4\text{He}$, ${}^6\text{He}$, ${}^8\text{He}$ e ${}^{10}\text{He}$ con buoni risultati, permettendo lo studio di questa catena isotopica in maniera quantitativa. La scelta di questa catena è giustificata sia in base ai buoni risultati ottenuti per il nucleo ${}^4\text{He}$ sia per il fatto che essa presenti molti aspetti interessanti per considerazioni fisiche. I limiti di stabilità nucleare sono stati riprodotti con precisione, non trovando nuclei legati oltre il ${}^{10}\text{He}$. Sono stati studiati i tre nuclei che presentano *halo*, confrontando i risultati con i dati sperimentali e trovando buoni accordi per quanto riguarda i raggi di carica di ${}^6\text{He}$ e ${}^8\text{He}$, e per le energie di legame dei nuclei con shell doppiamente chiuse. Infine è stato affrontato uno studio sistematico delle code delle distribuzioni di neutroni in questa catena, mostrando l'andamento asintotico delle funzioni d'onda oltre la superficie nucleare.

Bibliografia

- [1] W. D. Myers and W. J. Swiatecki. The Macroscopic Approach to Nuclear Masses and Deformations. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, 32:309–334, 1982.
- [2] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill, 1971.
- [3] E. Epelbaum, H.-W. Hammer, and Ulf-G. Meißner. Modern theory of nuclear forces. *Rev. Mod. Phys.*, 81:1773–1825, Dec 2009.
- [4] J. Dechargé and D. Gogny. Hartree-fock-bogolyubov calculations with the *d1* effective interaction on spherical nuclei. *Phys. Rev. C*, 21:1568–1593, Apr 1980.
- [5] Aage Bohr and Ben R Mottelson. *Nuclear Structure*. World Scientific, 1998.
- [6] P. Ring and P. Schuck. *The nuclear many-body problem*. Springer-Verlag, New York, 1980.
- [7] T. Skyrme. The effective nuclear potential. *Nucl. Phys. A*, 9:615–634, 1959.
- [8] D. Vautherin and D. M. Brink. Hartree-fock calculations with skyrme’s interaction. i. spherical nuclei. *Phys. Rev. C*, 5:626–647, Mar 1972.
- [9] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer. A skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities part ii. nuclei far from stabilities. *Nuclear Physics A*, 635(1–2):231 – 256, 1998.
- [10] Jerry W. Ehlers and Steven A. Moszkowski. Hartree-fock calculations for double-closed-shell nuclei using the modified delta interaction. *Phys. Rev. C*, 6:217–227, Jul 1972.

- [11] G. Colò, L. Cao, N. Van Giai, and L. Capelli. Self-consistent RPA calculations with Skyrme-type interactions: The `skyrme_rpa` program. *Computer Physics Communications*, 184:142–161, January 2013.
- [12] K. Bennaceur and J. Dobaczewski. Coordinate-space solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogolyubov equations within spherical symmetry. The Program HFBRAD (v1.00). *Comput. Phys. Commun.*, 168:96–122, 2005.
- [13] Jerry W. Ehlers and Steven A. Moszkowski. Hartree-fock calculations for double-closed-shell nuclei using the modified delta interaction. *Phys. Rev. C*, 6:217–227, Jul 1972.
- [14] J. P. Blaizot and G. Ripka. *Quantum Theory of Finite Systems*. The MIT Press, 1986.
- [15] D.M. Brink and E. Boeker. Effective interactions for hartree-fock calculations. *Nuclear Physics A*, 91(1):1 – 26, 1967.
- [16] Giampaolo Co’ and Antonio M. Lallena. Tensor interaction in hartree-fock calculations. *Nuovo Cim.*, A111:527–538, 1998.
- [17] David M. Brink and Ricardo A. Broglia. *Nuclear Superfluidity*. Cambridge University Press, 2005.
- [18] V. B. Soubbotin, V. I. Tselyaev, and X. Viñas. Quasilocal density functional theory and its application within the extended thomas-fermi approximation. *Phys. Rev. C*, 67:014324, Jan 2003.
- [19] R. Hooverman. A technique for numerical solution of the schroedinger equation with non-local potentials. *Nuclear Physics A*, 189:155–160, July 1972.
- [20] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in C (2Nd Ed.): The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [21] Conrad Sanderson. Armadillo: An open source c++ linear algebra library for fast prototyping and computationally intensive experiments. Technical report, NICTA, 2010.
- [22] P. Mueller, I. A. Sulai, A. C. C. Villari, J. A. Alcántara-Núñez, R. Alves-Condé, K. Bailey, G. W. F. Drake, M. Dubois, C. Eléon, G. Gaubert, R. J. Holt, R. V. F. Janssens, N. Lecesne, Z.-T. Lu, T. P. O’Connor, M.-G. Saint-Laurent, J.-C. Thomas, and L.-B. Wang. Nuclear Charge Radius of He8. *Physical Review Letters*, 99(25):252501, December 2007.

- [23] L.-B. Wang, P. Mueller, K. Bailey, G. W. F. Drake, J. P. Greene, D. Henderson, R. J. Holt, R. V. F. Janssens, C. L. Jiang, Z.-T. Lu, T. P. O'Connor, R. C. Pardo, K. E. Rehm, J. P. Schiffer, and X. D. Tang. Laser spectroscopic determination of the ${}^6\text{He}$ nuclear charge radius. *Phys. Rev. Lett.*, 93:142501, Sep 2004.

