



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO
FACOLTÀ DI SCIENZE E TECNOLOGIE

Corso di Laurea triennale in Fisica

Costruzione del potenziale nucleare
efficace di Kohn-Sham dalle densità
empiriche

Tesi di Laurea di
Iuri Macocco
Matricola 811218

Relatore:
Prof. Gianluca Colò

Correlatore:
Dott. Xavier Roca-Maza

Anno Accademico 2014-2015

Indice

0.1	Notazione e costanti utilizzate	5
1	Introduzione	7
2	Gli strumenti teorici	9
2.1	Lo stato dell'arte in fisica della struttura nucleare	9
2.1.1	Metodi <i>ab initio</i>	10
2.1.2	Metodi fenomenologici	11
2.1.3	Metodi di campo medio	11
2.2	La teoria del funzionale densità e le equazioni di Kohn-Sham	18
2.2.1	I teoremi di Hohenberg e Kohn	18
2.2.2	Lo sviluppo di Kohn-Sham	19
2.2.3	Una tentativo di applicazione in fisica nucleare	21
3	Sviluppo e test del modello	23
3.1	Inversione delle equazioni di Kohn-Sham	23
3.2	Implementazione del codice	25
3.2.1	Risoluzione dell'equazione di Schrödinger	25
3.2.2	Un primo test: l'oscillatore armonico	27
3.2.3	Il potenziale di Woods-Saxon	27
3.3	I primi risultati	30
4	Inversione delle equazioni di Kohn-Sham e costruzione del potenziale efficace	35
4.1	Inversione e calcolo del nuovo potenziale	35
4.2	Il procedimento iterativo	36
4.3	Le densità empiriche	37
4.4	I potenziali efficaci	42
5	Conclusioni	47
A	La simmetria sferica	49
A.1	Gli operatori e le autofunzioni	49
A.2	Semplificazione della densità	50
A.3	Applicazione dell'operatore laplaciano per ricavare il potenziale	52

B	Richiami di analisi funzionale	53
C	Fourier	55
C.1	La trasformata in simmetria sferica	55
C.2	La trasformata della densità di carica	55
C.3	L'antitrasformata	57

0.1 Notazione e costanti utilizzate

Lungo il presente documento saranno adottate le seguenti notazioni e le costanti assumeranno i valori qui indicati (salvo dove esplicitamente indicato).

Numero di neutroni N

Numero di protoni Z

Numero di nucleoni $A = N + Z$

Massa protone $M_p = 938.27 \text{ MeV}$

Massa neutrone $M_n = 939.57 \text{ MeV}$

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

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

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

Operatore Laplaciano ∇^2

Fonte per le costanti fondamentali: physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html

Generalmente le energie saranno date in MeV (10^6 eV) e le lunghezze in fermi ($1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$).

Capitolo 1

Introduzione

La fisica nucleare teorica è interessata allo sviluppo di modelli che permettano di spiegare e predire le proprietà dei nuclei in accordo con le misure sperimentali. Una via per calcolare queste osservabili per un vasto numero di nuclei, stabili e instabili, sia nel loro *ground state* che per i livelli eccitati, è rappresentata dai metodi di campo medio. I nucleoni in questo caso sono trattati come particelle non interagenti soggette ad un potenziale efficace.

I metodi di campo medio in ambito nucleare sono stati sviluppati negli ultimi quarant'anni e applicati in diversi modi. In particolare riscontrano attualmente molto successo i potenziali costruiti a priori solamente osservando le simmetrie del sistema studiato. Ovviamente questi potenziali dipendono da un certo numero di parametri che devono essere fittati sui dati sperimentali. Questo tipo di procedimento, come si mostrerà in seguito, si può anche basare sulla descrizione dell'energia del sistema tramite un funzionale della densità opportunamente scelto. Una volta attribuita un'Hamiltoniana, o un funzionale dell'energia, a un dato sistema risulta quasi immediato ottenerne la densità associata. Esiste però una procedura che permette di invertire questo problema e risalire al potenziale efficace a partire dalla densità del sistema in questione. Tale procedura è descritta dalla teoria del funzionale densità (DFT), uno strumento che in fisica atomica si è dimostrato eccezionalmente valido e predittivo. Si tratta di una via mai tentata in fisica nucleare dal momento che presenta notevoli difficoltà se affrontata cercando di tenere in conto di tutti i termini che giocano un ruolo nell'interazione nucleare efficace. Tuttavia addentrarsi in questo territorio, con le dovute precauzioni e approssimazioni, potrebbe comunque offrire spunti e prospettive interessanti.

In particolare nel presente lavoro si è considerato l'articolo di Parr e Wang [1] e la procedura ivi indicata per invertire le equazioni di Kohn-Sham ed estrarre il potenziale associato ad una data densità. Le equazioni sono state scritte nello specifico caso di simmetria sferica, semplificazione che permetterebbe tuttavia di analizzare ancora un notevole numero di nuclei. Sarà

però necessario considerare ulteriori restrizioni. Infatti in ambito nucleare le densità sperimentali utilizzabili risultano disponibili solo per i protoni, quelle relative ai neutroni presentano ancora delle incertezze troppo elevate. Pertanto dovremo assumere identiche le densità delle due specie di nucleoni. Questo comporta di limitare l'analisi a nuclei leggeri, ovvero in cui il termine coulombiano sia piccolo, con ugual numero di protoni e neutroni, di modo che il termine di simmetria sia nullo, e che presentino shell chiuse. Essenzialmente nel presente lavoro ci si concentrerà su ^{16}O e ^{40}Ca . Si andranno allora a costruire i potenziali associati a densità empiriche parametrizzate con diverse funzioni e si analizzeranno criticamente i risultati ottenuti.

Capitolo 2

Gli strumenti teorici

In questo capitolo verrà data una motivazione del presente lavoro, introducendo alcuni dei progressi della fisica nello studio delle proprietà nucleari.

2.1 Lo stato dell'arte in fisica della struttura nucleare

La fisica della struttura nucleare si occupa dello studio delle proprietà nucleari statiche, quali massa, energia di legame, possibili decadimenti, e spettroscopiche, cioè relative ai diversi stati eccitati del nucleo. La relativa branca teorica è impegnata nello sviluppo di modelli microscopici sempre più accurati che spieghino e interpretino le osservazioni sperimentali.

Il nucleo atomico è un sistema composto da un numero A di nucleoni suddivisi in Z protoni, dotati di carica elementare positiva, e N neutroni, globalmente neutri, che a loro volta sono dotati di una struttura interna. I loro costituenti sono particelle fermioniche chiamate quark, le quali interagiscono attraverso lo scambio di particelle bosoniche dette gluoni. Questi aspetti fondamentali della fisica subnucleare sono oggetto di studi avanzati da parte della cromodinamica quantistica (QCD). Tuttavia si riscontra che buona parte delle proprietà nucleari è trattabile in termini di un'interazione efficace, detta interazione nucleare, che ha come gradi di libertà i soli nucleoni ed è in questo contesto che andrà a collocarsi il presente lavoro.

I modelli di interazione efficace sviluppatisi a partire dagli anni '50 – '60 del secolo scorso, il cui intento consiste nel fornire spiegazione teorica alle misure sperimentali, possono essere raccolti in tre macro-gruppi, ciascuno dotato dei propri pregi ma anche delle proprie debolezze. I metodi *ab initio*, basati sulla costruzione di un'interazione nucleone-nucleone (NN) nel vuoto e su una soluzione del problema a molti corpi a partire da essa, mettono in luce rilevanti aspetti della fisica fondamentale ma sono applicabili ad un ristretto campione di sistemi (o alla materia uniforme o a nuclei leggeri). I modelli macroscopici fenomenologici, che si fondano sul sistematico confron-

to con i dati sperimentali, offrono un'eccellente descrizione delle proprietà nucleari ma richiedono elaborazioni *ad hoc* e parametri liberi, pertanto risultano poco predittivi. Infine vi sono i metodi di campo medio, che trattano i nucleoni come particelle libere immerse nel potenziale efficace generato dagli altri membri del nucleo; questi modelli in particolare risultano finora essere i più efficienti. Viene infatti abbinata un'ottima capacità descrittiva ad una vastità di applicazione senza eguali, oltre alla possibilità di estrapolare risultati affidabili anche laddove non vi siano state ancora conferme sperimentali. Il concetto di campo medio, come sarà mostrato in seguito, è legato alla teoria del funzionale densità di energia, fatto che permette di reinterpretare e declinare questi metodi in molteplici varianti che lasciano spazio a tentativi e percorsi differenti.

Segue una breve introduzione ai modelli elencati, in particolare il metodo di campo medio sarà discusso in maniera più approfondita, dal momento che costituisce l'ambito entro cui andrà ad essere contestualizzato il presente lavoro.

2.1.1 Metodi *ab initio*

Non esiste tuttora un modo di derivare esattamente il potenziale NN nel vuoto dalla QCD, nonostante recenti e significativi progressi (per i quali si rimanda a [2] e referenze incluse). I potenziali fenomenologici sono basati su un ansatz funzionale, e sul fit dei parametri su dati di scattering NN, ma non c'è un modo univoco di parametrizzarli.

Relativamente alla "pura" interazione NN (ovvero nel vuoto, non rinormalizzata) sono note fenomenologicamente le seguenti caratteristiche:

- repulsione a corto range
- forte dipendenza da spin e isospin
- forte termine di spin-orbita
- termini tensoriali
- non località

I modelli cosiddetti *ab initio* cercano dunque di estrapolare le osservabili nucleari a partire dalla risoluzione (esatta per quanto possibile) di problemi a molti corpi espressi in termini di interazioni "elementari". Chiaramente le complicazioni crescono aumentando il numero dei nucleoni coinvolti.

E' evidente che i tentativi di scrivere un potenziale efficace contenente tutti questi termini portano ad hamiltoniane di difficile risoluzione già per un sistema a due corpi. Una simile descrizione permette comunque di riprodurre le proprietà basilari della saturazione nucleare, ma solo qualitativamente. Infatti, non appena ci si trova ad affrontare già solo problemi a

tre corpi, modelli che prevedono la sola interazione nucleone-nucleone non sono in grado di portare ai risultati quantitativi trovati sperimentalmente. Gli accurati potenziali NN devono essere allora integrati necessariamente introducendo (almeno) un termine a tre corpi, fatto che sottolinea come l'interazione nucleare sia di natura solamente efficace e non fondamentale. I dettagli dell'origine microscopica della forza a tre corpi sono tuttavia ancora oggetto di studio.

Risulta allora chiaro come i modelli *ab initio*, nonostante offrano un'importante interpretazione della natura dei legami fra nucleoni, siano poco efficaci e maneggevoli, perfino inutilizzabili quando si analizzano nuclei con numero di massa superiore a circa $A = 10 \approx 12$: i sistemi descrivibili con successo tramite questi metodi sono, attualmente, esigui. Si rivela inoltre molto difficile trattare i fenomeni di eccitazione collettiva del nucleo.

2.1.2 Metodi fenomenologici

All'altro estremo nella scala dei modelli nucleari si trovano i metodi fenomenologici, generalmente riassumibili nel celebre modello a goccia simboleggiato dalla altrettanto celebre formula di Bethe-Weizsäcker

$$E_{legame}(A, Z) = -a_1 A + a_2 A^{\frac{2}{3}} + a_3 \frac{Z(Z-1)}{A^{\frac{1}{3}}} + a_4 \frac{(A-2Z)^2}{A} \pm a_5 A^{-\frac{3}{4}}. \quad (2.1)$$

L'energia viene parametrizzata in termini di proprietà globali quali volume e superficie del nucleo, simmetria tra nucleoni, repulsione coulombiana, etc. I parametri che regolano queste dipendenze sono tutti modellati fenomenologicamente. Per questo motivo il modello a goccia descrive piuttosto accuratamente l'andamento medio delle energie di legame. Un possibile miglioramento del modello, che tiene conto delle correzioni legate agli effetti quantici di suddivisione in shell, viene calcolato servendosi dello spettro di energia ottenuto da un potenziale medio fenomenologico di singola particella. Si parla allora di metodi microscopici-macroscopici (mic-mac), dotati ormai, dopo successivi perfezionamenti, di alte capacità descrittive (si veda [3] ad esempio). La grande accuratezza di questi modelli giunge però a caro prezzo: risulta infatti necessaria un'elevata modellizzazione *ad hoc*. Questa pecca rende difficili e poco affidabili eventuali estrapolazioni verso nuclei poco conosciuti, con conseguenti scarse potenzialità predittive e generalità.

2.1.3 Metodi di campo medio

Tra i due modelli di concezione diametralmente opposta appena descritti si trovano metodi che si collocano a livello microscopico ma trattano il problema a molti corpi tramite approssimazioni e l'introduzione di un'interazione efficace. Tra questi, i modelli auto-consistenti di campo medio (Self-Consistent Mean-Field, SCMF) sono senza dubbio quelli maggiormente impiegati, dal

momento che combinano ottime capacità descrittive, trasparente significato fisico e buone potenzialità predittive. Grazie a recenti sviluppi teorici e computazionali, le simulazioni con metodi SCMF hanno compiuto grandi passi avanti permettendo di calcolare con precisione, oltre alle osservabili di base, caratteristiche dei livelli eccitati e proprietà di nuclei lungo tutta la tavola degli isotopi, non esclusi i limiti della valle di stabilità e i nuclei super-pesanti. Il successo di questi modelli è ormai tale che risulta necessario introdurre correlazioni oltre il campo medio per migliorare la qualità della descrizione ottenuta. Si rimanda all'articolo [4] e referenze per approfondimenti in merito.

La possibilità di servirsi un campo medio per descrivere il potenziale efficace percepito dal singolo nucleone è conseguenza di un semplice ragionamento: nonostante il nucleo sia composto da elementi fortemente interagenti, esso non presenta un'elevata densità nel senso che risulta "diluato". E' noto che la densità del bulk nucleare è approssimativamente costante ($\approx 0.16 \text{ fm}^{-3}$) ed è quindi lecito immaginare che ciascun nucleone percepisca un potenziale che sia la media delle interazioni con tutti gli altri. Assumendo infatti che il raggio nucleare sia $R \approx r_0 A^{1/3}$ allora un nucleo sferico ha un volume corrispondente a

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi r_0^3 A, \quad (2.2)$$

che significa un volume per nucleone $V/A \approx 4r_0^3$ e una distanza media fra nucleoni di $4^{1/3}r_0 \approx 2 \text{ fm}$. Ciò significa che i nucleoni, in media, non sono soggetti alla forte componente repulsiva del potenziale NN, il cui raggio d'azione è decisamente più limitato (circa 0.3 fm) del libero cammino medio calcolato e misurato, come si descrive ad esempio in [5]. Questa osservazione, unita alle caratteristiche di sistema diluito, legittima l'introduzione e l'utilizzo di una teoria di campo medio, fatto che viene supportato da diversi esperimenti, primo su tutti la diffusione dei nucleoni, dal momento che l'ampiezza di scattering misurata corrisponde alla trasformata di Fourier del potenziale con cui il nucleone sonda ha interagito (il campo medio, appunto). L'ipotesi di campo medio viene confermata dalle osservazioni che portano alla costruzione di un modello a shell con forti gap di separazione fra i livelli energetici di singola particella, come se il nucleone fosse immerso in una buca di potenziale. Una volta appurato che l'interpretazione di un campo medio nucleare è fondata, è lecito chiedersi come sia fatto tale campo e come procedere per costruirlo, con lo scopo di trovare un metodo quanto più generale che permetta di riprodurre le proprietà delle varie specie nucleari. Un primo tentativo di trovare un campo medio può essere costituito dall'approssimazione di Hartree-Fock, che suppone l'esistenza a priori di un'Hamiltoniana e prescrive una particolare forma per la funzione d'onda a molti corpi.

La teoria Hartree-Fock

La teoria di Hartree-Fock si prefigge lo scopo di fornire una spiegazione microscopica all'esistenza di un campo medio nucleare. Sia data un'Hamiltoniana

$$H = T + V \quad (2.3)$$

dove

$$T = \sum_{\alpha} -\frac{\hbar^2}{2m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 \quad (2.4)$$

è il termine cinetico e

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} v(\mathbf{r}_{\alpha}, \mathbf{r}_{\beta}) \quad (2.5)$$

il potenziale a due corpi con il quale si decide di approssimare l'interazione fra nucleoni.¹ La teoria di HF assume che la funzione d'onda incognita a N particelle possa essere approssimata con un determinante di Slater, ovvero una combinazione lineare totalmente antisimmetrica dei prodotti di autofunzioni di singola particella φ_i :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \sum_P (-)^P \psi_{P_1}(\mathbf{r}_1) \dots \psi_{P_A}(\mathbf{r}_A) \quad (2.6)$$

dove la sommatoria è da eseguire su tutte le possibili permutazioni P sugli indici $1, \dots, A$. Il termine $(-)^P$ è denominato segnatura della permutazione e risulta positivo se il numero di scambi effettuati è pari e negativo se tale cifra è invece dispari. La procedura di HF consiste allora nel cercare lo stato fondamentale del sistema in oggetto tra le autofunzioni scrivibili come determinanti di Slater tramite la minimizzazione del valore di aspettazione dell'energia. Si procede scrivendo il valore medio di H

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \equiv E[\Psi], \quad (2.7)$$

e successivamente si minimizza E imponendo la condizione:

$$\delta E = 0. \quad (2.8)$$

Al fine di garantire l'ortonormalità delle funzioni è sufficiente aggiungere un moltiplicatore di Lagrange, che trasforma la (2.8) in

$$\delta \left(E - \sum_i \varepsilon_i \int d^3r \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) \right). \quad (2.9)$$

¹La dipendenza da spin e isospin viene trascurata per semplicità di notazione. E' inoltre possibile effettuare il calcolo tenendo conto anche della presenza di un termine a tre corpi

Ora si scrive separatamente la (2.7) per il termine cinetico

$$\langle \Psi | T | \Psi \rangle = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_i} \int d^3r \psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.10)$$

e per il potenziale

$$\begin{aligned} \langle \Psi | V | \Psi \rangle = & \frac{1}{2} \sum_{i,j} \iint d^3r d^3r' \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}') + \\ & -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \iint d^3r d^3r' \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}') \psi_j(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.11)$$

La trasformazione della funzione d'onda di A particelle in determinante di Slater ci ha permesso di trattare il sistema a molti corpi in termini di semplici operatori a uno (nel caso del laplaciano) o due corpi (per il potenziale) e autofunzioni di singola particella. Assumendo che

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

si osserva che il primo membro al lato destro della (2.11) può essere riscritto nella seguente forma

$$\frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \rho(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}'). \quad (2.13)$$

Risulta ora immediato fornirne un'interpretazione fisica: si tratta dell'energia associata all'overlap, punto per punto, della densità di probabilità del sistema pesate sul potenziale a due corpi. Questo contributo all'energia si definisce termine *diretto* o di *Hartree*. E' invece meno immediato dare un significato al membro successivo della (2.11); si tratta di un termine non interpretabile classicamente e non locale associato alla natura fermionica delle particelle in analisi: per questa ragione assume il nome di termine di *scambio* o di *Fock*.

Si effettui ora la variazione indicata in (2.8) rispetto a ψ_i^* (o indifferentemente rispetto a ψ_i , dato che le informazioni ottenute coincidono); si rimanda all'appendice B per specifiche circa l'analisi funzionale. In particolare vale che

$$\frac{\delta}{\delta \psi_i^*} = \frac{\delta \rho}{\delta \psi_i^*} \frac{\delta}{\delta \rho} \stackrel{(2.12)}{=} \psi_i \frac{\delta}{\delta \rho}, \quad (2.14)$$

per cui si ottiene il seguente set di equazioni

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + \sum_i^A \int d^3r' \psi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_j(\mathbf{r}') \right] \psi_i(\mathbf{r}) + \\ & - \sum_i^A \int d^3r' \psi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}') \psi_j(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.15)$$

La (2.15) rappresenta un insieme di equazioni di Schrödinger agli autovalori di singola particella ε_i non ordinarie, dal momento che il potenziale dipende dalle autofunzioni: matematicamente si tratta di un sistema di equazioni integro-differenziali che deve essere risolto in maniera iterativa auto-consistente a partire da autofunzioni (o, alternativamente, potenziali) di prova. Analizzando ancora la (2.15) vi si ritrova nuovamente il termine di Hartree che, attraverso la definizione di densità (2.12), può essere riscritto nella forma

$$V_H(\mathbf{r})\psi_i(r) = \int d^3r' v(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

e simboleggia l'interazione dell' i -esima particella con l'insieme di tutte le altre distribuite secondo la densità ρ . Il terzo membro sul lato sinistro dell'equazione (2.15), o termine di Fock, evidentemente non può essere scritto, al contrario del termine di Hartree, come un semplice potenziale che moltiplica una funzione d'onda. Questi due termini insieme definiscono il *campo medio* percepito dalle singole particelle.

Declinazione della teoria HF all'ambito della fisica nucleare e la nascita dei funzionali densità

Le equazioni HF applicate al caso nucleare con l'interazione NN nel vuoto, o non rinormalizzata, risultano tuttavia inutilizzabili; infatti, a causa della componente repulsiva a breve range del potenziale, il termine di Hartree (2.13) per $r \approx r'$ divergerebbe. Inoltre semplici calcoli con metodi *ab initio* portano a funzioni d'onda dello stato fondamentale fortemente correlate, all'opposto di come vengono rappresentate tramite determinante di Slater. Pertanto risulta necessario introdurre delle parametrizzazioni apposite per le forze e i potenziali da inserire nella procedura iterativa HF. Al momento le interazioni efficaci più utilizzate sono le forze di Gogny [6], di natura gaussiana, e le forze a range nullo di Skyrme [7], le quali contengono termini proporzionali a delle δ di Dirac. Quest'ultima parametrizzazione in particolare elimina la non località del termine di Fock rendendolo proporzionale a quello di Hartree. Simulazioni effettuate con queste interazioni efficaci permettono attualmente di ottenere per le energie di legame uno scarto dai risultati sperimentali dell'ordine di 1 MeV. Si veda ad esempio [8] e referenze.

La teoria di campo medio tramite interazioni efficaci per particelle indipendenti tuttavia può essere trattata in modo più generale dal momento che la funzione d'onda considerata è un determinante di Slater. La densità ad essa associata risulta essere

$$\hat{\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (2.17)$$

ed è un operatore idem-potente, per cui vale che $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. Allora si può dimostrare (come ad esempio hanno fatto P. Ring e P. Schuck in [9]) che gli

elementi di matrice di un'Hamiltoniana per un determinante di Slater danno luogo a funzioni della sola densità ρ definita in (2.17). Di conseguenza l'equazione (2.7) e in generale i problemi HF possono essere riscritti in termini di funzionali della sola densità piuttosto che dell'intera funzione d'onda antisimmetrizzata. Si noti che questo resta vero anche se si parla di un V che sia funzione di ρ . Si parla allora di interazioni efficaci *density-dependent*. Ad esempio, alla luce di questo teorema, i calcoli presentati nella sezione 2.1.3 possono essere riscritti in una forma più compatta. La (2.7), data dalla somma di (2.10) e (2.11) diventa

$$E_{HF}[\rho] = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \rho_{ki} \bar{v}_{ijkl} \rho_{lj}, \quad (2.18)$$

dove $\bar{v}$ è l'elemento di matrice a due corpi antisimmetrizzato che corrisponde a $(v_{ijkl} - v_{ijlk})$ e gli indici i, j, k, l numerano gli stati di singola particella di una generica base. Poiché si ha un'equivalenza fra il determinante di Slater e la densità ad esso associata, l'Hamiltoniana HF di campo medio può essere ricavata anche dalla (2.18) tramite una variazione di energia rispetto alla densità, da cui l'Hamiltoniana di HF discende come

$$h_{lk} = \frac{\partial E[\rho]}{\partial \rho_{kl}} = t_{lk} + \sum_{ij}^A \bar{v}_{ijkl} \rho_{ji}, \quad (2.19)$$

e le equazioni di HF (2.15) si riscrivono come

$$h_{lk} \psi_k = \varepsilon_l \delta_{lk} \psi_k \quad (2.20)$$

Il concetto di funzionale densità $E[\rho]$ non è legato all'esistenza di un'Hamiltoniana efficace dipendente dalla densità $H_{eff} = f(\rho)$, ma è anzi una teoria molto più generale [10]. E' infatti possibile scrivere il funzionale direttamente a partire da assunti fenomenologici usando specifiche combinazioni di densità, correnti, densità di spin, correnti di spin, ecc. (e derivate successive di queste quantità) che siano compatibili con le simmetrie sottostanti al sistema (i.e. traslazionale, rotazionale, parità, conservazione del numero di particelle, inversione temporale, trasformazioni di Galileo o di Lorentz). In generale data un'Hamiltoniana è sempre possibile scrivere il funzionale densità ad essa associato (tramite la (2.7)), ma non è sempre vero il contrario: la classe dei funzionali densità risulta più ampia.

Che siano basati su un approccio relativistico o meno, i metodi Energy Density Functional puntano a fornire una dettagliata e completa descrizione dei singoli nuclei sia per lo stato fondamentale che per alcune proprietà spettroscopiche, soprattutto per quanto riguarda gli andamenti sistematici su un ampio range di nuclei conosciuti, al fine di fornire affidabili estrapolazioni circa specie nucleari per le quali i dati sperimentali non sono accessibili.

Tuttavia le parametrizzazioni finora utilizzate sono inevitabilmente fenomenologiche, dal momento che si basano su forme funzionali postulate empiricamente le cui costanti di accoppiamento sono scelte servendosi di un set prescelto di dati sperimentali. Si pongono spontaneamente allora le seguenti questioni:

- quale sia il legame tra le parametrizzazioni usate e le interazioni efficaci NN, NNN, ..., AN più microscopiche, dal momento che tale relazione non risulta né esplicitata né qualitativamente trasparente;
- quali siano le effettive potenzialità predittive dei risultati dei metodi EDF estrapolati verso territori sperimentalmente inesplorati

La mancanza di un fondamento microscopico spesso porta a predizioni dipendenti dallo specifico modello in uso e discordanti dai dati conosciuti.

Alla luce delle conoscenze attuali, le parole di T. Duguet [11, p. 299] sono senza dubbio le più indicate per riassumere e sintetizzare le prospettive della fisica della struttura nucleare:

In order to improve on the limitations [of present analysis] and make EDF calculations truly reliable, several routes must be followed in the future. On the one hand, a better understanding of the foundations of the method and an explicit connection to elementary inter-nucleon interactions must be realized. On the other hand, empirically adjusted parametrizations must rely on advanced fitting and statistical analysis techniques.

Questa esposizione, seppur breve e solamente introduttiva, corredata dalla suddetta conclusione mostra come non esista ancora una strada univoca e certa di modellizzare la struttura interna del nucleo. Ciò significa che non è priva senso l'idea di percorrere nuove vie e tentare nuovi approcci al problema: il presente lavoro punta proprio in questa direzione, dato che si tratta di uno sforzo esplorativo verso strade non ancora battute, i cui risultati non sono garantiti a priori.

In particolare si cercherà di applicare ai nuclei finiti la teoria del funzionale densità (DFT) di Kohn-Sham (finora declinata solo in ambito atomico) con lo scopo di trovare una forma esatta per il potenziale nucleare a partire dalla conoscenza delle densità, un obiettivo decisamente ambizioso e per questo non scontato. Il problema non sarà comunque trattato nella sua massima generalità: saranno analizzate solo particolari specie nucleari che permettono di ottenere risultati soddisfacenti pur senza richiedere sforzi analitici e computazionali eccessivi per gli scopi del presente lavoro.

Si procede dunque ad una rapida ma necessaria introduzione alla teoria del funzionale densità come metodo alternativo per approcciare i problemi a molti corpi: ovvero esporremo su quali teoremi si basa, le relative interpretazioni fisiche, la declinazione all'ambito nucleare.

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

2.2.1 I teoremi di Hohenberg e Kohn

La teoria del funzionale densità risale alla metà degli anni 60 del Novecento, ma solo più tardi si è iniziato a comprenderne le enormi potenzialità. La riprova più immediata si ha nel numero, in costante aumento, di lavori che la impiegano nei campi di applicazione più disparati. Una diffusione su così larga scala è legata alla relativa semplicità di utilizzo e ad una notevole accuratezza ottenibile anche con ridotti sforzi computazionali.

L'idea alla base della DFT consiste nel calcolare l'energia di un sistema di molti fermioni come funzionale della densità di particelle. Si tratta di una teoria nata con lo scopo di descrivere la struttura elettronica di atomi, molecole e solidi nel loro stato fondamentale, ma in generale può essere esportata ad altri sistemi i cui componenti siano particelle fermioniche, come, ad esempio, il nucleo.

L'intera teoria si basa su due teoremi che Hohenberg e Kohn (HK) hanno dimostrato nel loro articolo risalente al 1964 [12] (a cui si rimanda per ulteriori dettagli). Il primo teorema sancisce che

Dato un sistema con N fermioni interagenti in un potenziale esterno V_{ext} , esiste una corrispondenza biunivoca tra l'energia totale in presenza del V_{ext} (definita come funzionale della densità ρ delle particelle) e la densità stessa.

Di conseguenza risulta in corrispondenza biunivoca anche la Hamiltoniana di campo medio e tutte le proprietà da questa derivabili. Si tratta di un risultato tutt'altro che ovvio. Mentre risulta chiaro che dato un potenziale V_{ext} , se il sistema in analisi presenta uno stato fondamentale non degenerare, vi è un'unica densità per lo stato fondamentale ad esso associato, non è banale trovare che questa corrispondenza deve essere biunivoca. Il secondo teorema è in realtà solamente un corollario del primo e afferma che

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

Nella sua prima formulazione con elettroni interagenti, il funzionale energia corrisponde a

$$E_V[\rho] = \langle \Psi | T + U_{ee} + V_{ext} | \Psi \rangle \quad (2.21)$$

dove T è il termine cinetico, U_{ee} rappresenta l'interazione tra gli elettroni e V_{ext} è il potenziale esterno (in un sistema atomico si tratta dell'attrazione coulombiana dovuta agli ioni carichi positivamente). La (2.21) può essere

sviluppata come

$$\langle \Psi | T + U_{ee} | \Psi \rangle + \langle \Psi | V | \Psi \rangle = F[\rho(\mathbf{r})] + \int d^3r V_{ext}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}), \quad (2.22)$$

in cui il primo $F[\rho(\mathbf{r})]$ è universale, cioè non dipende dallo specifico sistema considerato). Come enunciato dal secondo teorema di HK, il funzionale (2.22) restituisce il valore minimo dell'energia in corrispondenza della densità associata allo stato fondamentale e dunque per trovarlo è sufficiente differenziare $E_V[\rho]$ rispetto alla densità e imporre l'annullamento di questa quantità. Per effettuare l'operazione è necessario conoscere esplicitamente i termini in questione, tuttavia i teoremi di HK non forniscono un'espressione per F .

2.2.2 Lo sviluppo di Kohn-Sham

Nel 1965 Kohn e Sham pubblicarono l'articolo [13] in cui il problema della DFT venne riformulato in una forma più adatta ad un uso pratico: fu aperta la strada ad applicazioni ed utilizzi della DFT. L'idea di fondo consiste semplicemente nel mappare un generico sistema di fermioni interagenti in un sistema ausiliario di fermioni non interagenti con la stessa densità. Sarà allora possibile associare a ciascuna particella un'autofunzione ψ_i detto *orbitali di Kohn-Sham*. Trattandosi di insiemi di fermioni si ha che la funzione d'onda totale, alla quale siamo interessati solo parzialmente, corrisponde a un determinante di Slater (vedi (2.6)) mentre la densità associata è data da

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.23)$$

Il funzionale $F[\rho]$ precedentemente definito in (2.22), che contiene i contributi all'energia provenienti dal termine cinetico e da quello di interazione, è convenientemente riscritto come

$$F = F_{non-interagente} + E_{interazione}, \quad (2.24)$$

dove $F_{ni} \equiv T_s$ è essenzialmente l'energia cinetica associata al sistema non interagente, E_{int} l'energia di interazione per cui

$$E[\rho(\mathbf{r})] = T_s[\rho(\mathbf{r})] + E_{int}[\rho(\mathbf{r})] + \int d^3r V_{ext}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) \quad (2.25)$$

Chiaramente T_s risulta diverso dal vero T , ma la differenza viene riassorbita proprio da E_{int} .

Imponendo le stesse condizioni già usate per ricavare le equazioni di Hartree-Fock (2.8) e (2.9) si procede a differenziare la (2.25) ottenendo così le equazioni di Kohn-Sham

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\delta E_{int}[\rho(\mathbf{r})]}{\delta \rho(\mathbf{r})} + V_{ext} \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (2.26)$$

Sostituendo

$$\frac{\delta E_{int}[\rho(\mathbf{r})]}{\delta \rho(\mathbf{r})} + V_{ext}(\mathbf{r}) = V_{eff}(\mathbf{r}), \quad (2.27)$$

la (2.26) diventa

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.28)$$

dove $V_{eff}(\mathbf{r})$ in pratica è il potenziale efficace di campo medio del sistema. Essenzialmente le equazioni di Kohn-Sham permettono di ridefinire un problema di fermioni interagenti eliminando l'interazione fra le particelle ma andando a modificare il potenziale a cui queste sono soggette mantenendo la densità del sistema invariata, come si mostra in figura 2.1. Di conseguenza il potenziale efficace che regola il sistema dipende dalla densità, come sancito dal primo teorema di HK (vedi 2.2.1).

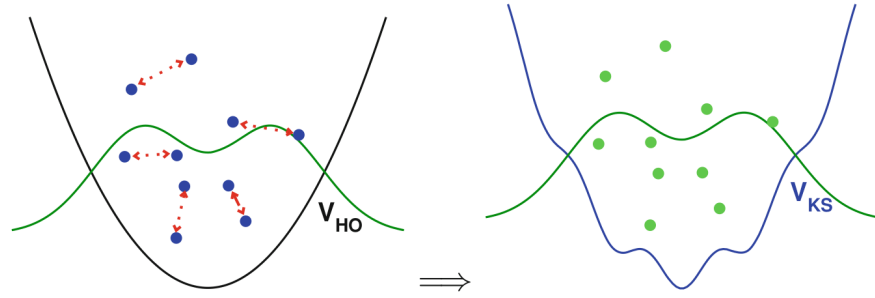


Figura 2.1: Esempio di KS DFT per un potenziale armonico. Sulla sinistra il sistema interagente, sulla destra il sistema non interagente di KS associato. I profili delle densità sono identici per costruzione. Tratto da [14]

Le equazioni di Kohn-Sham permettono di risalire con accuratezza a tale potenziale efficace avendo a disposizione una densità affidabile. Diverse procedure in merito sono elencate in [15] e relative referenze.

In genere in ambito elettronico l'energia di interazione viene separata come

$$E_{int} = E_H + E_{XC}, \quad (2.29)$$

dove E_H l'energia di Hartree (o interazione elettrone-elettrone classica) definita in (2.13) e E_{XC} rappresenta l'interazione residua e viene detto contributo di *scambio e correlazione*. Si tratta di un funzionale della densità non locale e non analitico che contiene tutta l'informazione (sebbene implicita) non considerata dagli altri termini del funzionale energia totale. Si può osservare come la (2.25) differenziata conduce direttamente alle equazioni di Hartree qualora E_{XC} venisse trascurato. Ovviamente anche la DFT consiste in un'approssimazione, ma riesce ad andare ben oltre le semplici

2.2. LA TEORIA DEL FUNZIONALE DENSITÀ E LE EQUAZIONI DI KOHN-SHAM 21

teorie di Hartree o Hartree-Fock dal momento che la complicata dipendenza dalla densità del termine E_{XC} permette di includere molti contributi in più (idealmente *tutti*) e se E_{XC} , o alternatively V_{eff} , fossero conosciuti, le equazioni di Kohn-Sham restituirebbero l'energia esatta. Il primo e più grande limite della DFT consiste appunto nella difficoltà di assegnare una forma analitica al termine di scambio-correlazione E_{XC} . Ad esempio, sempre nell'articolo [13], Kohn e Sham proposero una prima forma espressione per l'energia di scambio-correlazione che è legata alla *Local Density Approximation* (LDA), secondo cui il funzionale è approssimato con una *funzione* della densità locale, ovvero

$$E_{XC} = \int d^3r \varepsilon(\rho(\mathbf{r}))\rho(\mathbf{r}). \quad (2.30)$$

Tuttavia tale approssimazione risulta spesso eccessiva, portando a risultati che si discostano significativamente dalle misure sperimentali.

Per approfondimenti si rimanda alle seguenti referenze, ciascuna delle quali presenta risultati di simulazioni che comprovano il successo della DFT e ne analizzano i limiti. Una panoramica generale può essere trovata nella review di Jones e Gunnarsson in [16] mentre per una introduzione sia teorica che pratica consiglia la lettura *A primer DFT* da cui sono state estratti i riferimenti [17] e [18], e per recenti sviluppi e fondamenti teorici si rimanda al testo *Density Functional Theory, an Approach to the Quantum Many-Body Problem* [19].

2.2.3 Una tentativo di applicazione in fisica nucleare

La DFT nacque con l'obiettivo di analizzare sistemi fermionici composti da elettroni: dal singolo atomo, alle molecole, ai solidi. In ambito nucleare la DFT ha mosso i suoi primi passi sotto forma di EDF tramite i già citati funzionali density-dependent di Gogny o Skyrme, come descritto da Vautherin e Brink in [8]. Esistono lavori in cui si sono espresse Hamiltoniane di KS, ma sempre a partire da funzionali locali della densità fittati fenomenologicamente: in questo senso il presente lavoro si può definire esplorativo.

Prima di passare alla dettagliata descrizione del modello, è necessario effettuare delle considerazioni preliminari. La prima differenza rispetto ai sistemi elettronici è rappresentata dalla presenza dell'interazione forte che permette al nucleo di essere un sistema auto-legato, ovvero non si ha un potenziale esterno al sistema dei nucleoni. Ciò significa che si porrà $V_{ext} = 0$. Inoltre, come anticipato nella sezione 2.1.3, l'approssimazione HF nell'ambito nucleare necessita di una trattazione specifica tutt'altro che semplice ed immediata tramite forze efficaci. Pertanto si è deciso di non esplicitare V_H e inglobarlo nel potenziale efficace di campo medio del nucleo V_{eff} associato all'energia di interazione. Un'altra peculiarità del nucleo è data dal fatto di

essere composto da due tipi di fermioni differenti: protoni e neutroni. Ciò significa che si dovrà lavorare con due densità e due potenziali distinti.

Per trovare il potenziale efficace sarà applicata una procedura (spiegata nel capitolo successivo) che permette di invertire le equazioni di KS e costruire V_{eff} a partire da una data densità. In particolare, grazie ai teoremi di HK, è possibile affermare che alla densità *vera* dovrà essere associato il potenziale *vero*.

Per sistemi elettronici, oltre a misurazioni sperimentali accurate, esistono metodi *ab initio* scuri che permettono di calcolare densità che possono essere usate come riferimento. In ambito nucleare la situazione è molto meno semplice. I dati sperimentali utilizzabili riguardano solamente i protoni, le cui misurazioni di densità vengono effettuate tramite esperimenti di scattering elettronico su nuclei sfruttando la sola interazione coulombiana. Per i neutroni ottenere lo stesso tipo di informazione non è altrettanto facile. Esistono esperimenti di scattering adronico, ma purtroppo in questo caso le sonde sono soggette alla forza forte, con conseguenti notevoli incertezze. Da un punto di vista numerico le densità estrapolate dalle simulazioni risultano fortemente dipendenti dalle parametrizzazioni usate per i funzionali energia.

Ci si limiterà allora all'analisi delle sole densità protoniche, tenendo conto del fatto che non si hanno tutt'oggi densità di riferimento con una precisione comparabile a quella di sistemi elettronici, fatto che renderà anche meno affidabili le estrapolazioni sui potenziali associati. Di conseguenza sarà possibile e utile studiare nuclei per i quali il termine di simmetria neutroni-protoni sia nullo e il potenziale coulombiano non giochi un ruolo eccessivamente rilevante, così da poter assumere che i due tipi di nucleoni presentino la medesima densità. Congiunti alla scelta di porsi in simmetria sferica e di trovare sistemi per i quali esistano sufficienti dati sperimentali, lo studio sarà limitato ai nuclei ^{16}O e ^{40}Ca .

Nel prossimo capitolo sarà sviluppato il modello specifico, con il dettaglio dei calcoli e delle equazioni utilizzate per effettuare le simulazioni.

Capitolo 3

Sviluppo e test del modello

3.1 Inversione delle equazioni di Kohn-Sham

Tra i vari metodi possibili per invertire le equazioni di Kohn-Sham, ovvero ricavare il potenziale efficace a partire da una densità data, si è scelto di seguire il procedimento indicato da Wang e Parr nell'articolo [1]. Per iniziare si considerino le autofunzioni $\psi_i(\mathbf{r})$ e gli autovalori ε_i di singola particella ottenuti risolvendo l'equazione di Schrödinger contenente il potenziale di KS (2.28)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{KS}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

in cui $V_{KS}(\mathbf{r})$ è dato da

$$V_{KS}(\mathbf{r}) = V_{ext}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{XC}(\mathbf{r}) \quad (3.2)$$

Come discusso nella sezione 2.2.3, nel caso nucleare il termine $V_{ext}(\mathbf{r})$ relativo al potenziale esterno è assente mentre quello di Hartree $V_H(\mathbf{r})$ non è isolabile. Pertanto $V_{KS}(\mathbf{r})$ coincide con $V_H + V_{XC}(\mathbf{r})$ e rappresenta il potenziale che include parte diretta, di scambio e correlazione e la cui espressione analitica non è conosciuta: si tratta anzi dell'oggetto che si sta ricercando, che contiene tutta l'informazione circa il campo medio nucleare. Come anticipato nel capitolo riguardante le equazioni di Kohn-Sham 2.2.2, dal momento che la funzione d'onda a N particelle è stata fattorizzata in un determinante di Slater, per la densità vale che

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (3.3)$$

Il teorema di Hohenberg-Kohn 2.2.1 afferma che vi è una corrispondenza biunivoca tra la densità $\rho(\mathbf{r})$ e il potenziale efficace $V_{KS}(\mathbf{r})$ (a meno di una semplice costante additiva sul potenziale). Pertanto siamo interessati a trovare un potenziale che, attraverso la (3.1), generi la densità cercata: quello

sarà allora il potenziale efficace esatto e come conseguenza avremo ottenuto anche i corretti orbitali di KS.

A partire dall'equazione di Schrödinger (3.1), moltiplicando a sinistra per i complessi coniugati delle autofunzioni e risolvendo rispetto a $V_{KS}(\mathbf{r})$, si ottiene la seguente espressione per il potenziale

$$V_{KS}(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r}) - \sum_i \frac{1}{\varepsilon_i} \psi_i^*(\mathbf{r}) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_i(\mathbf{r})}{\sum_i \frac{1}{\varepsilon_i} \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r})} \quad (3.4)$$

Allora, data una certa densità di riferimento, è possibile risalire al potenziale ad essa associato tramite un procedimento iterativo:

- si risolve la (3.1) con un potenziale efficace $V^0(\mathbf{r})$ di prova
- le autofunzioni e gli autovalori così trovati sono inseriti nella (3.4) insieme alla densità data
- applicando la (3.4) si ottiene un nuovo potenziale di prova

La procedura va ripetuta fino al raggiungimento della convergenza (meglio specificata in seguito). L'equazione (3.4) può essere ulteriormente rielaborata: indicando con gli indici alti l' i -esimo step iterativo si ottiene che

$$V^i(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r}) - \rho^i(\mathbf{r})}{\sum_j \frac{1}{\varepsilon_j} \psi_j^{i*}(\mathbf{r}) \psi_j^i(\mathbf{r})} + V^{i-1}(\mathbf{r}) \quad (3.5)$$

dove le $\psi_j^i(\mathbf{r})$ sono le autofunzioni trovate risolvendo la (3.1) con il potenziale $V^{i-1}(\mathbf{r})$ e $\rho^i(\mathbf{r}) = \sum_j \psi_j^{i*}(\mathbf{r}) \psi_j^i(\mathbf{r})$. L'espressione (3.4) purtroppo non è molto maneggevole nella sua forma più generale. Tuttavia le specie nucleari che si è in procinto di analizzare sono caratterizzate dall'avere shell chiuse, ovvero orbitali completi. Pertanto è possibile risolvere il problema in simmetria sferica, scelta che comporta numerosi semplificazioni da un punto di vista algebrico.

Applicazione della simmetria sferica al modello

Come mostrato in appendice A.2, nel caso particolare di simmetria sferica la densità dipende solamente dalla coordinata radiale e come conseguenza assume un'espressione molto compatta

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) u_{\alpha}^2(r). \quad (3.6)$$

L'indice α raccoglie i numeri quantici $n_{\alpha}, l_{\alpha}, j_{\alpha}$: notare bene che non si ha più dipendenza dall'indice m_j . Il coefficiente $2j_{\alpha} + 1$ sta ad indicare il numero di particelle che si trovano nell' α -esimo autostato e fisicamente significa che tutti gli orbitali considerati appartengono a shell chiuse.

Grazie alla simmetria scelta anche il secondo termine al numeratore del membro destro dell'equazione (3.4) può essere riscritto esplicitamente tenendo conto delle equazioni sopra descritte. Si ottiene infatti che

$$\Psi_\alpha^*(\mathbf{r})\nabla^2\Psi_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi}(2j_\alpha + 1) \left[\frac{u_\alpha(r)}{r^2} \frac{\partial^2 u_\alpha(r)}{\partial r^2} - \frac{u_\alpha(r)^2}{r^4} l_\alpha(l_\alpha + 1) \right]. \quad (3.7)$$

Anche in questo caso l'indice α corrisponde ai numeri quantici $n_\alpha, l_\alpha, j_\alpha$. Per il calcolo esplicito di questo termine si rimanda all'appendice A.3.

3.2 Implementazione del codice

La procedura iterativa consiste nella risoluzione successiva delle equazioni (3.1) e (3.4) (o alternativamente della (3.5)) per un numero sufficiente di volte, fino ad ottenere la convergenza. Il problema è da risolversi necessariamente in modo numerico e a tale scopo si è scelto di usare il linguaggio di programmazione C++.

3.2.1 Risoluzione dell'equazione di Schrödinger

Come specificato in appendice A, ponendosi in simmetria sferica il problema diventa indipendente dalle coordinate angolari e la (3.1) si trasforma in un'equazione monodimensionale nella coordinata radiale:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V_{KS}(r) \right] u(r) = E u(r). \quad (3.8)$$

A livello matematico la (3.8) è un'equazione differenziale ordinaria del secondo ordine in r con le seguenti condizioni al contorno

$$\lim_{r \rightarrow 0} u(r) \propto r^{l+1}, \quad (3.9a)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} u'(r) \propto (l+1)r^l. \quad (3.9b)$$

Tra i numerosi metodi già noti per la risoluzione di tali problemi si è scelto di servirsi del metodo Runge-Kutta al quarto ordine: la soluzione dell'equazione viene costruita a passi equidistanti h a partire dalle condizioni al contorno nell'origine (3.9) per $u(r)$ e $u'(r)$. L'errore sulla funzione finale sarà del quarto ordine sul passo di integrazione, cioè $O(h^4)$. L'algoritmo è in grado di trovare la funzione $u(r)$ fino a un valore finito r_{max} , che deve accuratamente scelto. Infatti maggiore è il punto di arrivo e più breve è il passo utilizzato, tanto più tempo sarà necessario per disegnare le soluzioni.

Poiché si stanno cercando le autofunzioni che corrispondono a stati legati all'interno del nucleo ed è noto che il potenziale medio in prima approssimazione è assimilabile a una buca di potenziale con superficie diffusa, ci aspettiamo che tali autofunzioni tendano a zero esponenzialmente una volta

oltrepasata la superficie nucleare. Pertanto si è ritenuto opportuno imporre sul punto finale $r = r_{max}$ la condizione al contorno secondo cui la funzione debba andare a 0 a meno di un errore, ossia

$$|u(r_{max})| < err. \quad (3.10)$$

Vi è un ulteriore fattore a cui bisogna prestare attenzione: trattandosi di un problema agli autovalori, l'equazione presenta un parametro incognito, cioè l'energia. Pertanto, per determinare le autofunzioni e gli autovalori una possibilità consiste nel ripetere i seguenti step:

- si inseriscono due valori E_1 ed E_2 di prova;
- si effettua la procedura per ottenere le due autofunzioni corrispondenti;
- si controlla se le autofunzioni ottenute presentano valori discordi in r_{max} , in tal caso significa che l'autovalore è compreso fra E_1 ed E_2 ;

A questo punto si avvia un processo di bisezione per cui si calcola un nuovo possibile autovalore $E_{temp} = (E_1 + E_2)/2$ e se ne deriva la relativa autofunzione. Si sostituisce allora E_{temp} all'autovalore di partenza che presenta un'autofunzione concorde a quella appena trovata e si ripete la bisezione sul nuovo intervallo di autovalori. La procedura, denominata *shooting*, si reitera finché la condizione (3.10) non è soddisfatta.

Le scelte dell'errore sulla condizione al contorno finale, del valore da assegnare a r_{max} e del passo da utilizzare sono state effettuate provando diverse combinazioni. Per quanto riguarda l' ^{16}O la larghezza del box, ovvero il valore di r_{max} , è stata fissata a 10 fm, mentre per il ^{40}Ca a 13 fm. In entrambi i casi la precisione richiesta sulla condizione al contorno finale è stata di 10^{-8} mentre il passo è stato fissato a $h = 0.005$ fm. In particolare si è osservato che con questi parametri il ciclo sopra descritto converge in un tempo ragionevole e gli autovalori di energia non cambiano apprezzabilmente modificando r_{max} . Dal momento che più avanti saranno utilizzate anche altre specie nucleari per effettuare test intermedi, è opportuno notare che i valori stabiliti per r_{max} corrispondono a circa 3 volte il raggio nucleare stimato nella sezione 0.1.

Le autofunzioni associate a ciascun autovalore trovato dovranno poi venire normalizzate in simmetria sferica, cioè rispettare la condizione

$$\int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1, \quad (3.11)$$

rammentando che l'estremo superiore nel calcolo numerico dell'integrale si limiterà a r_{max} . Dal momento che le autofunzioni sono risultati numerici dell'equazione differenziale costruiti tramite Runge-Kutta, esse sono già in

forma discreta (o vettoriale). Pertanto i diversi integrali sono stati calcolati tramite il metodo dei trapezoidi utilizzando direttamente il passo con cui le autofunzioni stesse sono state calcolate. In questo modo l'errore sul valore degli integrali è dell'ordine di $O(h^2)$, cioè circa $10^{-5} - 10^{-6}$ col passo utilizzato. Una volta che le autofunzioni sono state normalizzate allora per la densità, a partire da (3.6), vale che

$$\int \rho(r) d^3r = \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) \int u_{\alpha}^2(r) dr = \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1), \quad (3.12)$$

cioè l'integrale della densità nello spazio deve restituire il numero di particelle totali (a meno dell'errore legato alla precisione del metodo dei trapezi).

Questa prima parte dell'algoritmo, benché molto semplice, è stata preferita ad altri codici già implementati (e sicuramente più efficienti) al fine di tenere sotto controllo con facilità l'algoritmo stesso e poter modificare liberamente i diversi parametri in gioco.

3.2.2 Un primo test: l'oscillatore armonico

Per testare la bontà dell'algoritmo finora implementato si è pensato di sperimentare il programma con un problema la cui soluzione sia nota analiticamente; in particolare si è scelto l'oscillatore armonico tridimensionale, il cui potenziale è

$$V_{arm}(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2. \quad (3.13)$$

Gli autovalori di energia dipendono da due numeri quantici indipendenti n ed l secondo

$$E_{nl} = \hbar \omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) \quad (3.14)$$

cioè sono tutti multipli semi-interi del quanto di energia. Nella tabella seguente sono riportati alcuni autovalori in unità di $\hbar \omega$. Come si può osservare i valori ottenuti risultano corretti almeno fino alla settima cifra decimale.

Una volta verificata la correttezza dell'algoritmo si è passati ad analizzare direttamente un potenziale di campo medio che simuli con maggiore precisione le proprietà nucleari, potenziale che sarà poi utilizzato come input di prova nel metodo iterativo.

3.2.3 Il potenziale di Woods-Saxon

La procedura iterativa, per riuscire a convergere e portare a un risultato, ha bisogno di un punto di partenza che sia non eccessivamente dissimile dal punto di arrivo. Una delle possibilità consiste nell'utilizzare come prova iniziale il potenziale di Woods-Saxon, dal momento che riproduce fedelmente alcune delle proprietà nucleari. Si tratta di un'approssimazione in campo

n	l	E_{esatta}	E_{alg}
0	0	3/2	1.50000016
0	1	5/2	2.49999999
1	0	7/2	3.50000055
0	2	7/2	3.50000000
1	1	9/2	4.49999998
0	3	9/2	4.50000000
1	2	11/2	5.50000000

Tabella 3.1: Autovalori in unità di $\hbar\omega$; si è usato $\hbar\omega = \frac{41}{A^{1/3}}$ e $A = 50$. Questa scelta deriva dalla possibilità di approssimare il campo medio nucleare con una buca armonica la cui frequenza soddisfi la condizione appena indicata. Per ulteriori specifiche si rimanda a [20, pp. 40-42].

medio, cioè si suppone che ciascun nucleone sia immerso in un potenziale esterno dovuto a tutti gli altri nucleoni circostanti, ma a differenza del caso HF o KS tale campo medio ha una forma data e imposta con lo scopo di riprodurre le principali proprietà del modello a shell. Esplicitamente si ha [vedi 20, pp. 43-48]

$$V_{WS}(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R_n}{a_0}}} + V_{SO}(r) + V_C(r). \quad (3.15)$$

Per il primo membro, che contiene l'informazione relativa alla parte centrale del potenziale e ne costituisce la parte principale, si assume che

$$V_0 = 51 \pm 33 \frac{N-Z}{N+Z} \text{ MeV}. \quad (3.16)$$

La quantità con segno alternato rappresenta il termine di simmetria, in particolare il segno + vale per i protoni, mentre il segno - per i neutroni. Grazie a questa correzione si tiene conto del fatto che il legame p-n è più forte sia del legame n-n, che del legame p-p. Ne consegue allora che, ad esempio, aumentando N e mantenendo Z stabile, il potenziale risulterà più legante per i protoni e meno per i neutroni. Il secondo contributo al potenziale rappresenta l'interazione di spin-orbita

$$V_{SO}(r) = \frac{k_0}{r} \left(\frac{r_0}{\hbar} \right)^2 \left[\frac{d}{dr} \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R_n}{a}}} \right] \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (3.17)$$

e per la costante di proporzionalità si è usato: $k_0 = 0.44 V_0$. Questo termine traduce l'accoppiamento del momento angolare orbitale con il momento angolare intrinseco di ciascun nucleone. Passando nella base accoppiata e tenendo in considerazione la natura fermionica dei nucleoni, dotati di spin pari a 1/2, si ha

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2}{2} = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - 3/4]. \quad (3.18)$$

L'ultimo elemento del potenziale rappresenta l'interazione coulombiana, che chiaramente coinvolge soltanto i protoni. Al classico termine diretto va aggiunto il termine di scambio per il quale ci si è serviti dell'approssimazione di Slater [21] (o di densità locale) definita da

$$E_C^{ex} = -\frac{3q_e^2}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \int \rho_p^{\frac{4}{3}}(\mathbf{r}) d^3r, \quad (3.19)$$

dove ρ_p è la densità dei protoni. Questa espressione fornisce il risultato esatto nella materia infinita. Grazie a questa approssimazione il potenziale totale di Coulomb a un corpo diventa

$$V_C(\mathbf{r}) = \frac{q_e^2}{2} \left[\int \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' - \left(\frac{3}{\pi}\rho_p(\mathbf{r})\right)^{\frac{1}{3}} \right]. \quad (3.20)$$

La parte diretta, per poter essere integrata numericamente, è comodamente riscritta come

$$V_{diretto} = q_e^2 \left(\frac{1}{r} \int_0^r 4\pi \rho_p(r') r'^2 dr' + \int_r^\infty 4\pi \rho_p(r') r' dr' \right) \quad (3.21)$$

L'estremo superiore di integrazione del secondo membro della (3.21) sarà sostituito da r_{max} .

Il termine coulombiano può tuttavia essere approssimato in svariati modi; il più immediato (ma anche meno accurato) consiste nel trattare il nucleo come una sfera carica uniformemente. In tale situazione si ha che la densità di protoni è banalmente data da

$$\rho_p(r) = \frac{3Z}{4\pi R_n^3} \quad (3.22)$$

e il potenziale corrispondente, che può essere calcolato analiticamente, assume la seguente forma

$$V_{Coulomb} = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{Zq_e^2}{R_n} \left[3 - \left(\frac{r}{R_n}\right)^2 \right] & r \leq R_n \\ \frac{Zq_e^2}{r} & r > R_n \end{cases} \quad (3.23)$$

Per aumentare la capacità predittiva di questo modello, e rendere il potenziale più simile a quello che si ottiene con altri metodi più raffinati, è sufficiente sostituire a R_n il valore di

$$R_U = R_n \sqrt{\frac{1 + (5s^2/2R_n^2)}{1 + (3s^2/4R_n^2)}} \quad (3.24)$$

dove $s = 2.0$ fm, come riportato nella Ref. [22]. In questo modo si verifica che il potenziale generato dalla distribuzione di carica uniforme geometricamente sferica di raggio R_U si avvicina molto al potenziale associato a una più

realistica distribuzione di Fermi. Nella prossima sezione saranno riportati i grafici dello spettro, delle autofunzioni e delle densità ottenute per il ^{40}Ca considerando tutti i parametri qui elencati che compongono il Woods-Saxon. Saranno inoltre confrontati i risultati con dati sperimentali.

3.3 I primi risultati

Una volta implementati tutti i termini del potenziale Woods-Saxon (3.15), sono state svolte alcune simulazioni per le specie in analisi, ricavando spettri, autofunzioni e densità. Di seguito, come esempio, viene riportato per esteso il caso del ^{40}Ca . Successivamente verranno mostrati gli spettri relativi a ^{16}O , ^{48}Ca e ^{208}Pb , completi di tutti gli stati legati ricavati. I calcoli sono stati effettuati servendosi dell'interazione di spin-orbita specificata da (3.17) e l'interazione coulombiana in approssimazione di sfera uniforme, esplicitata da (3.23).

Analizzando lo spettro degli autovalori in tabella 3.2 e la relativa figura 3.1 è già possibile riscontrare diverse proprietà dei nuclei note dalla teoria. La

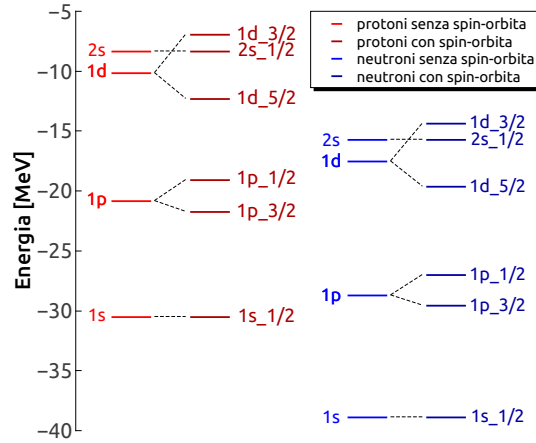


Figura 3.1: Spettri a confronto per il ^{40}Ca .

differenza degli autovalori di energia tra protoni e neutroni è dovuta interamente all'interazione coulombiana, dal momento che il termine di simmetria è nullo. E' immediato notare dall'immagine 3.1 come i livelli energetici si addensino a formare dei gruppi tra i quali sono presenti dei grossi gap energetici. Si può cioè affermare di essere riusciti a replicare il modello a shell del nucleo. Gli autovalori trovati possono essere confrontati con misure empiriche. E' infatti possibile misurare le energie degli stati legati del nucleo tramite esperimenti di transfer, che consistono in reazioni nucleari quali

$$^{40}\text{Ca} + d \rightarrow ^{41}\text{Ca} + p, \quad (3.25)$$

<i>orb</i>	$E_{neut}[MeV]$	$E_{prot}[MeV]$
1 <i>s</i>	-38.84	-30.46
1 <i>p</i>	-28.66	-20.79
1 <i>d</i>	-17.46	-10.10
2 <i>s</i>	-15.68	-8.31
1 <i>f</i>	-5.84	—
2 <i>s</i>	-4.88	—

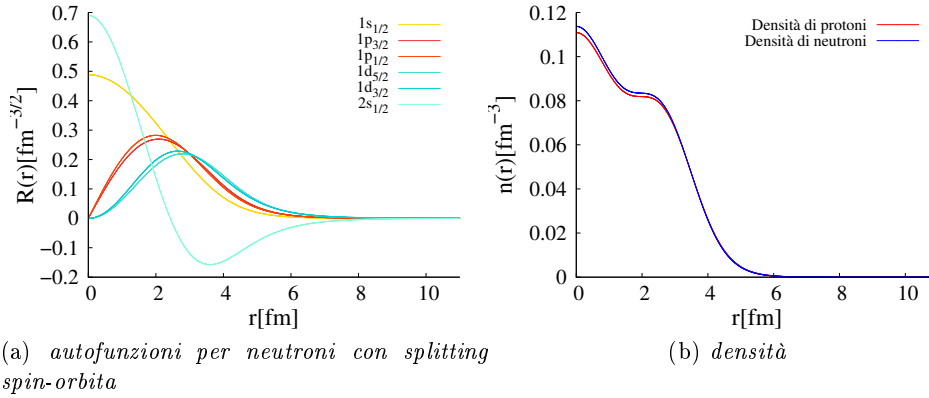
(a) senza spin-orbita

<i>orb</i>	$E_{neut}[MeV]$	$E_{prot}[MeV]$
1 <i>s</i> _{1/2}	-38.84	-30.46
1 <i>p</i> _{3/2}	-29.54	-21.69
1 <i>p</i> _{1/2}	-26.94	-19.02
1 <i>d</i> _{5/2}	-19.61	-12.27
2 <i>s</i> _{1/2}	-15.68	-8.31
1 <i>d</i> _{3/2}	-14.31	-6.89
1 <i>f</i> _{7/2}	-9.32	-2.51
2 <i>p</i> _{3/2}	-5.67	—
2 <i>p</i> _{1/2}	-3.32	—
1 <i>f</i> _{5/2}	-1.35	—

(b) con spin-orbita

Tabella 3.2: Autovalori di singola particella per il ^{40}Ca .

dove d rappresenta un deutone e p un protone. Conoscendo l'energia iniziale del deutone e misurando energia finale e angolo di scattering del protone è possibile risalire alle proprietà del neutrone che si è legato al ^{40}Ca . Per approfondimenti in merito si rimanda all'articolo [23] e annesse referenze. Il confronto tra gli autovalori è esposto in tabella 3.6. Un ultimo appunto

Figura 3.2: ^{40}Ca ; le tonalità di colore delle autofunzioni indicano l'appartenenza alle diverse shell.

in merito agli autovalori riguarda gli *splitting* spin-orbita. In particolare si osserva come l'ampiezza della separazione fra i livelli energetici con stesso momento angolare orbitale cresca all'aumentare di l . Ciò è coerente con il fatto che il potenziale V_{SO} definito in (3.17) è proporzionale alla derivata del termine centrale del Woods-Saxon. Infatti, come mostra l'immagine 3.2(a), al crescere di l le autofunzioni presentano picchi spostati verso raggi mag-

giori, corrispondenti alla zona più ripida del termine centrale a cui è dunque associato un coefficiente di accoppiamento del potenziale di spin-orbita più elevato.

Raffrontando le immagini 3.2(a) e 3.2(b) è possibile distinguere il contributo dei picchi delle singole autofunzioni nella densità. Concentrandosi solamente sulla figura 3.2(b) si nota che le densità di protoni e neutroni si attestano attorno al tipico valore di saturazione di 0.08 fm^{-3} .

Di seguito sono riportate le tabelle con gli autovalori di singola particella per il ^{16}O 3.4, ^{48}Ca 3.3 e per il ^{208}Pb 3.5 ricavati sempre con il potenziale di Woods-Saxon specificato in 3.2.3. Nella tabella 3.6 si confrontano gli autovalori di neutroni calcolati con quelli citati nell'articolo [23]. Nell'ultima colonna si esplicita la differenza algebrica fra i dati numerici e quelli empirici. Si evince come la discrepanza tra i valori sia elevata nelle specie leggere, dell'ordine di 2 – 3 MeV ma si riduca drasticamente nel raffronto relativo al ^{208}Pb , dove lo scarto è consistentemente al di sotto di 1 MeV.

			<i>orb</i>	$E_{neut}[\text{MeV}]$	$E_{prot}[\text{MeV}]$
<i>orb</i>	$E_{neut}[\text{MeV}]$	$E_{prot}[\text{MeV}]$	$1s_{1/2}$	-35.02	-37.16
$1s$	-35.02	-37.16	$1p_{3/2}$	-26.72	-28.72
$1p$	-26.04	-27.90	$1p_{1/2}$	-24.71	-26.30
$1d$	-16.06	-17.43	$1d_{5/2}$	-17.76	-19.50
$2s$	-14.26	-15.17	$2s_{1/2}$	-14.26	-15.17
$1f$	-5.59	-6.23	$1d_{3/2}$	-13.56	-14.41
$2p$	-4.42	-4.21	$1f_{7/2}$	-8.41	-9.75
(a) senza spin-orbita			$2p_{3/2}$	-5.06	-5.08
			$2p_{1/2}$	-3.14	-2.47
			$1f_{5/2}$	-1.93	-1.67
			(b) con spin-orbita		

Tabella 3.3: Autovalori di singola particella per il ^{48}Ca .

Si può allora constatare che i coefficienti utilizzati per parametrizzare il potenziale di Woods-Saxon risultino idonei per descrivere con ottima approssimazione il campo medio nucleare per specie pesanti, mentre risulta grossolano per le specie più leggere.

La presente sezione si può concludere affermando di essere riusciti a risolvere numericamente le equazioni di Schrödinger di campo medio con un potenziale Woods-Saxon e aver riprodotto piuttosto fedelmente la struttura generale del nucleo e le più basilari proprietà spettroscopiche.

<i>orb</i>	$E_{neut}[MeV]$	$E_{prot}[MeV]$	<i>orb</i>	$E_{neut}[MeV]$	$E_{prot}[MeV]$
1s	-31.09	-27.26	1s _{1/2}	-31.09	-27.27
1p	-16.88	-13.40	1p _{3/2}	-18.61	-15.13
2s	-3.92	-1.10	1p _{1/2}	-13.47	-10.00
1d	-3.14	—	1d _{5/2}	-6.36	-3.25
			2s _{1/2}	-3.92	-1.10

(a) senza spin-orbita

(b) con spin-orbita

Tabella 3.4: Autovalori di singola particella per il ¹⁶O.

<i>orb</i>	$E_{neut}[MeV]$	$E_{prot}[MeV]$	<i>orb</i>	$E_{neut}[MeV]$	$E_{prot}[MeV]$
1s	-39.96	-31.06	1s _{1/2}	-39.96	-31.06
1p	-35.99	-27.82	1p _{3/2}	-36.12	-28.02
1d	-31.22	-23.50	1p _{1/2}	-35.75	-27.44
2s	-29.48	-20.62	1d _{5/2}	-31.59	-24.05
1f	-25.73	-18.30	1d _{3/2}	-30.68	-22.74
2p	-23.10	-14.42	2s _{1/2}	-29.48	-20.62
1g	-19.63	-12.35	1f _{7/2}	-26.50	-19.36
2d	-16.34	-7.76	1f _{5/2}	-24.79	-17.01
3s	-15.18	-6.09	2p _{3/2}	-23.35	-14.73
1h	-12.98	-5.73	2p _{1/2}	-22.61	-13.80
2f	-9.36	—	1g _{9/2}	-20.91	-14.07
3p	-7.89	—	1g _{7/2}	-18.15	-10.39
1i	-5.88	—	2d _{5/2}	-16.93	-8.51
2g	-2.41	—	2d _{3/2}	-15.47	-6.65
3d	-1.37	—	3s _{1/2}	-15.18	-6.09
4s	-1.26	—	1h _{11/2}	-14.89	-8.25
			1h _{9/2}	-10.86	-2.98
			2f _{7/2}	-10.34	-2.01
			1i _{13/2}	-8.51	-1.98
			3p _{3/2}	-8.19	—
			2f _{5/2}	-8.04	—
			3p _{1/2}	-7.29	—
			2g _{9/2}	-3.75	—
			1i _{11/2}	-3.02	—
			3d _{5/2}	-1.87	—
			1l _{15/2}	-1.81	—
			4s _{1/2}	-1.26	—

(a) senza spin-orbita

(b) con spin-orbita

Tabella 3.5: Autovalori di singola particella per il ²⁰⁸Pb.

<i>nucleo</i>	<i>orb</i>	$E_{WS}[MeV]$	$E_{sper}[MeV]$	$E_{WS} - E_{sper}$
^{16}O	$1p_{3/2}$	-18.61	-21.84	3.23
	$1p_{1/2}$	-13.47	-15.66	2.19
	$1d_{5/2}$	-6.36	-4.22	-2.14
	$2s_{1/2}$	-3.92	-3.35	-0.57
^{40}Ca	$1d_{5/2}$	-19.61	-22.39	2.78
	$2s_{1/2}$	-15.68	-18.19	2.51
	$1d_{3/2}$	-14.31	-15.64	1.33
	$1f_{7/2}$	-9.32	-8.62	-0.70
	$2p_{3/2}$	-5.67	-6.76	1.09
	$2p_{1/2}$	-3.32	-4.76	1.44
	$1f_{5/2}$	-1.35	-3.38	2.03
^{48}Ca	$1d_{5/2}$	-17.76	-17.31	-0.45
	$2s_{1/2}$	-14.26	-13.16	-1.10
	$1d_{3/2}$	-13.56	-12.01	-1.55
	$1f_{7/2}$	-8.41	-9.68	1.27
	$2p_{3/2}$	-5.06	-5.25	0.19
	$2p_{1/2}$	-3.14	-3.58	0.44
	$1f_{5/2}$	-1.93	-1.67	-0.26
^{208}Pb	$2f_{7/2}$	-10.34	-9.96	-0.38
	$1i_{13/2}$	-8.51	-8.92	0.41
	$3p_{3/2}$	-8.19	-8.12	-0.07
	$2f_{5/2}$	-8.04	-7.78	-0.36
	$3p_{1/2}$	-7.29	-7.72	0.43
	$2g_{9/2}$	-3.75	-3.73	0.02
	$1i_{11/2}$	-3.02	-3.11	0.09
	$3d_{5/2}$	-1.87	-2.22	0.35
	$4s_{1/2}$	-1.26	-1.81	0.55

Tabella 3.6: Confronto fra gli autovalori di neutroni calcolati con l'algoritmo descritto e sperimentali dalla referenza [23].

Capitolo 4

Inversione delle equazioni di Kohn-Sham e costruzione del potenziale efficace

In questo capitolo si andrà a descrivere la procedura iterativa che, basandosi su densità empiriche, permette di ricostruire il potenziale efficace.

4.1 Inversione e calcolo del nuovo potenziale

Dopo essere riusciti ad implementare numericamente l'equazione (3.1) ed aver analizzato un possibile potenziale di prova, in questa sezione si passa ad analizzare l'espressione (3.4) che, ricordiamo, permette di costruire un nuovo potenziale a partire da una data densità e dalle autofunzioni associate ad un'Hamiltoniana precedente. Poiché che si è optato di lavorare in sistemi a simmetria sferica, il secondo termine del numeratore al lato destro dell'equazione (3.4) è convenientemente riscritto come

$$\sum_i \frac{1}{\varepsilon_i} \psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \frac{1}{\varepsilon_\alpha} \frac{2j+1}{4\pi} \left[\frac{u_\alpha(r)}{r^2} \frac{\partial^2 u_\alpha(r)}{\partial r^2} - \frac{u_\alpha^2(r)}{r^4} l(l+1) \right] \quad (4.1)$$

con $\alpha \equiv (n, l, j)$, come si mostra esplicitamente in appendice A.3. A livello numerico l'unica difficoltà presentata dalla (4.1) è legata all'implementazione della derivata seconda di $u(r)$. A tal fine ci si è affidati all'algoritmo a cinque punti per il computo della derivata seconda discreta estratta dal manuale [24, p. 914]. E' possibile verificare il corretto funzionamento del codice semplicemente inserendo nella (3.4) la densità associata alle funzioni d'onda appena trovate invece che una densità di riferimento. Infatti in questo modo il potenziale fornito dall'equazione deve coincidere con quello usato per risolvere l'equazione di Schrödinger (3.1).

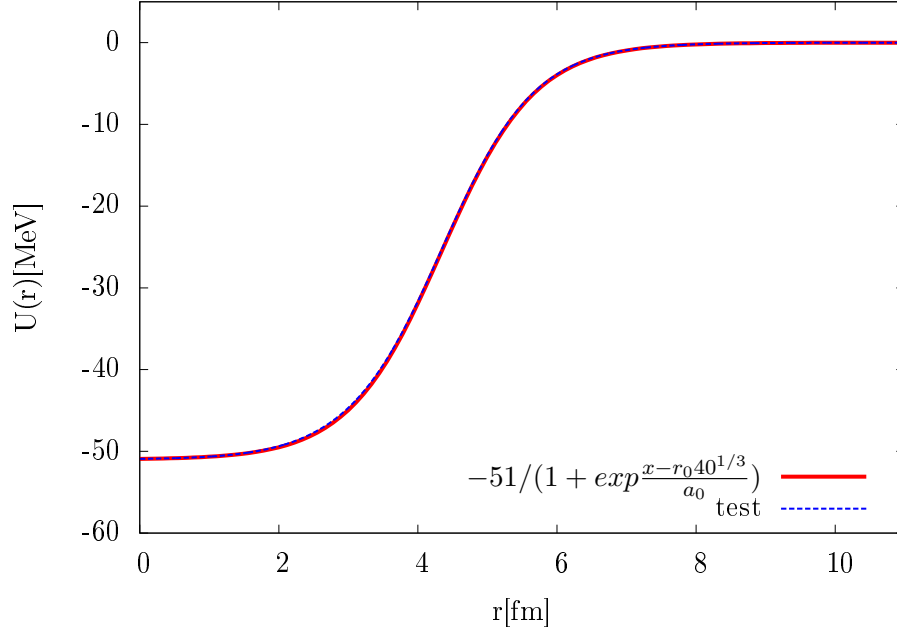


Figura 4.1: Potenziale per neutroni nel ^{40}Ca senza spin orbita; confronto fra espressione analitica e ricostruzione tramite l'equazione (3.4). Come si può notare i due grafici sono perfettamente sovrapposti.

Osservando i grafici di figura 4.1 si può asserire che il codice funzioni correttamente, dal momento che le curve dei due potenziali sono perfettamente sovrapponibili.

4.2 Il procedimento iterativo

Una volta risolte le equazioni (3.1) e (3.4) indipendentemente, è ora possibile passare al cuore del problema e affrontare il calcolo iterativo che porta alla costruzione del potenziale associato alle densità empiriche. Per prima cosa è necessario stabilire dei criteri di convergenza. Inizialmente si era pensato di imporre un vincolo inferiore sulla massima distanza relativa fra due potenziali successivi, ovvero

$$\max_{r < r_{max}} \left| \frac{V^i(r) - V^{i-1}(r)}{V^i(r)} \right| < \varepsilon, \quad (4.2)$$

dove l'apice indica la i -esima iterazione. Tuttavia effettuando le prime simulazioni ci si accorge che questo metodo non può funzionare: il potenziale infatti è definito a meno di una costante. Ciò significa che, qualora la costante trasli il potenziale in alto, la curva si può trovare ad attraversare l'asse delle ascisse in alcuni punti. Ma poiché nel calcolo della distanza relativa

si divide per il modulo della funzione stessa, nei punti vicini all'asse questa distanza praticamente diverge.

Si è allora deciso di optare per condizioni sui valori assoluti della distanza fra funzioni, ma riscalati in base ai valori tipici delle funzioni stesse. In particolare, fissato un ε , la convergenza di ritiene raggiunta se

$$\max_{r < r_{max}} |n(r) - n^i(r)| < 0.2\varepsilon \quad (4.3)$$

oppure se

$$\max_{r < r_{max}} |V^i(r) - V^{i-1}(r)| < 50\varepsilon, \quad (4.4)$$

dal momento che per le densità vale $0 < n(r) < 0.2$ (in fm^{-3}), mentre per i potenziali si ha $-70 < V(r) < 0$ (in MeV). Prima di inserire le densità sperimentali si sono effettuati dei nuovi test per controllare che il codice funzionasse correttamente. Ad esempio, considerando come *vera* la densità data da un potenziale Woods-Saxon, si è provato a servirsi di un Woods-Saxon leggermente modificato come primo potenziale di prova. A patto che quest'ultimo continuasse ad ammettere un sufficiente numero di autovalori e non differisse eccessivamente dal potenziale *vero*, la convergenza viene raggiunta soddisfacendo quasi simultaneamente le due condizioni indicate.

Il problema della costante additiva è stato risolto fittando il potenziale finale con una funzione esponenziale traslata; per le operazioni di fit ci si è affidati al software ROOT (<https://root.cern.ch>). Il coefficiente di traslazione calcolato viene poi sottratto al potenziale trovato, riportando la buca alla corretta profondità. Nel corso del calcolo successivo dei potenziali è risultato più conveniente in termini computazionali l'utilizzo della (3.5) rispetto alla (3.4). Infatti la seconda delle due equazioni citate necessita di calcolare ad ogni passaggio il laplaciano delle autofunzioni, procedura che, di iterazione in iterazione, propaga gli inevitabili errori numerici.

4.3 Le densità empiriche

Come anticipato nella sezione 2.2.3, i dati sperimentali riguardanti le densità nucleari sono pochi e limitati ai soli protoni. Le misure si basano su esperimenti di scattering di elettroni, particelle cariche e dunque sensibili alla repulsione coulombiana; in particolare viene misurato il momento trasferito q dalle particelle sonda al nucleo per poi ricostruire, attraverso la sezione d'urto misurata a diversi angoli di diffusione, la densità di carica dei protoni. Tuttavia le misure usate per estrapolare una distribuzione, tramite operazioni di fit, a partire da funzioni analitiche sono il risultato di un campionamento piuttosto limitato. E' inoltre necessario tenere in conto che le misure risultano affette da una maggiore incertezza per alti valori del momento trasferito (corrispondenti a piccoli r). Allo stesso modo anche i dati relativi a piccoli q (o alti r) sono soggetti ad grandi incertezze, dal momento

che la densità di carica del nucleo risulta molto bassa. Di conseguenza la parametrizzazione delle code delle distribuzioni, purché queste vadano a 0, risulta piuttosto arbitraria.

In tre articoli successivi, de Vries [25] ha riportato i risultati di numerosi esperimenti per le diverse specie nucleari, modellizzando le densità con differenti tipi di distribuzioni. I protoni, non essendo particelle puntiformi, presentano un fattore di forma, motivo per cui la densità di carica non coincide con quella di probabilità (definita come modulo quadro delle funzioni d'onda di singola particella). Si ha allora che la densità di carica è data da

$$\rho_{ch}(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \rho_{protone}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.5)$$

dove $\rho_{protone}$ è il fattore di forma.

L'inversione dell'equazione (4.5), per esplicitare $\rho(\mathbf{r})$ in funzione di $\rho_{ch}(\mathbf{r})$, risulta particolarmente difficoltosa; tuttavia, dal momento che si tratta di una convoluzione, è sufficiente passare nello spazio di Fourier per rendere tale integrale un semplice prodotto, cioè

$$\tilde{\rho}(\mathbf{q}) = \frac{\tilde{\rho}_{ch}(\mathbf{q})}{\tilde{\rho}_{protone}(\mathbf{q})}. \quad (4.6)$$

Per ottenere la densità, sarà sufficiente infine antitrasformare la $\tilde{\rho}(\mathbf{q})$.

La trasformata di Fourier tridimensionale è definita da

$$\mathcal{F}[f(\mathbf{r})] = F(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}), \quad (4.7)$$

mentre l'antitrasformata è

$$\mathcal{F}^{-1}[F(\mathbf{q})] = f(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3q e^{+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{q}). \quad (4.8)$$

In simmetria sferica la trasformata di Fourier si riduce ad un integrale monodimensionale

$$\tilde{f}(q) = 4\pi \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{q} r f(r) dr. \quad (4.9)$$

Corrispondentemente, l'antitrasformata risulta

$$f(r) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{r} q \tilde{f}(q) dq. \quad (4.10)$$

Al fine di evitare ulteriori complicanze e imprecisioni indissolubilmente legate alla trasformazione di funzioni per via numerica, si è deciso di usare

distribuzioni date da somme di gaussiane, maneggiabili anche analiticamente senza troppi sforzi. In particolare la parametrizzazione (in simmetria sferica) riportata in [25] è data da

$$\rho_{ch}(r) = \frac{1}{2\pi^{3/2}\gamma^3} \sum_i A_i \left[e^{-\left(\frac{r-R_i}{\gamma}\right)^2} + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\gamma}\right)^2} \right], \quad (4.11)$$

dove i coefficienti sono

$$A_i = \frac{Zq_e Q_i}{1 + 2R_i^2/\gamma^2}, \quad (4.12)$$

in cui Z è il numero di protoni, q_e la carica elementare, $\gamma = \sqrt{\frac{2}{3}\langle r^2 \rangle}$ il parametro associato alla larghezza della gaussiana mentre R_i e Q_i sono, rispettivamente, la posizione e l'ampiezza (o frazioni di carica) della i -esima gaussiana, di modo che $\sum_i Q_i = 1$. La distribuzione è normalizzata a $q_e Z$. La trasformata di tale densità risulta

$$\tilde{\rho}_{ch}(q) = e^{-\frac{q^2 \gamma^2}{4}} \sum_i A_i \left[\cos(qR_i) + \frac{2R_i}{q\gamma^2} \sin(qR_i) \right]. \quad (4.13)$$

Per quanto riguarda il fattore di forma del protone, una buona approssimazione consiste nel considerare anch'esso descritto da una distribuzione gaussiana

$$\rho_{protone}(r) = \frac{1}{\alpha^3 \pi^{3/2}} e^{-\frac{r^2}{\alpha^2}} \quad (4.14)$$

con $\alpha = (\frac{2}{3}\langle r_p^2 \rangle)^{1/2}$. Per il valore del raggio del protone si è utilizzato $\langle r_p^2 \rangle^{1/2} = 0.7956$ fm coerentemente con precedenti calcoli HF. La trasformata associata è

$$\tilde{\rho}_{protone}(q) = q_e e^{-\frac{q^2 \alpha^2}{4}}. \quad (4.15)$$

Applicando ora la (4.6), sostituendo $\beta = (\gamma^2 - \alpha^2)^{1/2}$ e antitrasformando si ottiene infine per la densità di protoni

$$\rho_p(r) = \frac{1}{2\pi^{3/2}\gamma} \sum_i A_i \left\{ e^{-\left(\frac{r-R_i}{\beta}\right)^2} \left[\frac{r+R_i}{\beta^3} - \frac{R_i}{\beta\gamma^2} \right] + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\beta}\right)^2} \left[\frac{r-R_i}{\beta^3} + \frac{R_i}{\beta\gamma^2} \right] \right\}. \quad (4.16)$$

Questa distribuzione è invece correttamente normalizzata a Z . Si osservi che ponendo $\alpha = 0$, che corrisponderebbe ad aver deconvoluto sull'identità, si riottiene coerentemente l'espressione (4.11).

Si procede ora ad analizzare le densità derivanti da misure sperimentali e quelle ricavate empiricamente. Per prime vengono riportate le densità di carica (in giallo) definite dalla eq. (4.11) sovrapposte alle densità di protoni (in blu) descritte da (4.13).¹ I grafici in alto nell'immagine 4.2 sono relativi

¹I parametri di ciascun nucleo sono specificati sempre nell'articolo [25].

a ${}^4\text{He}$ sulla sinistra e ${}^{12}\text{C}$ sulla destra, mentre ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$ sono riportati in fig. 4.3.

Nelle stesse immagini, le figure sottostanti mostrano sempre in blu, le

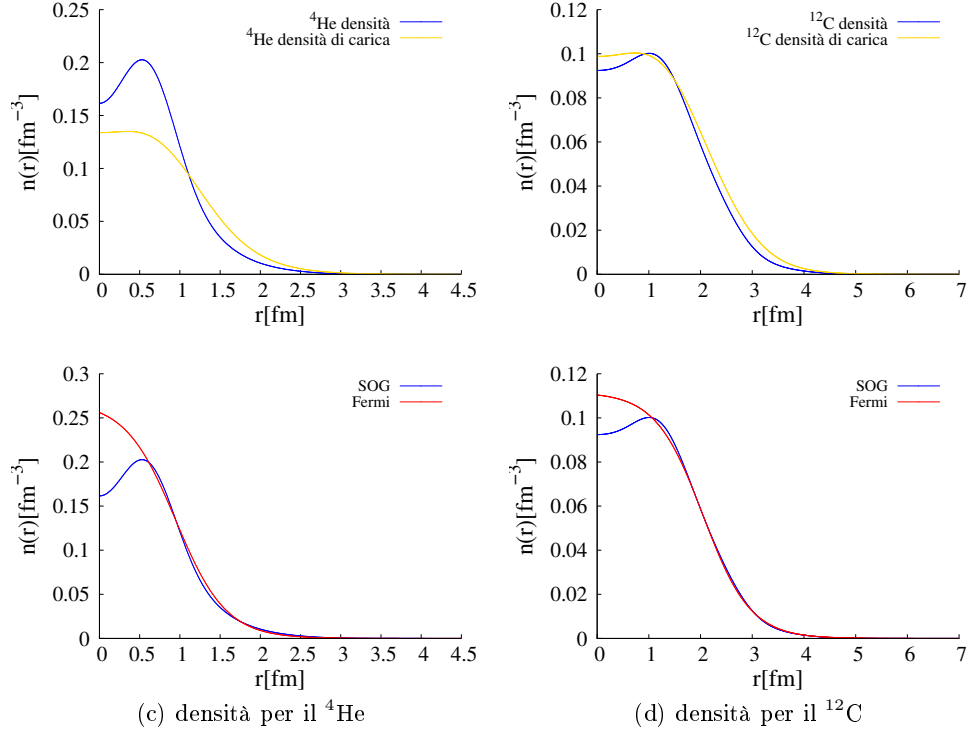


Figura 4.2: Densità parte 1.

densità di protoni date da (4.13) e denominate SOG da *Sum Of Gaussians*, affiancate da densità di protoni descritte da una funzione di Fermi a due parametri (in rosso):

$$\rho_{Fermi} = \frac{c_0}{1 + e^{(r-c_1)/c_2}}. \quad (4.17)$$

Queste sono state ricavate tramite operazioni di fit² basati sulle SOG di modo che i raggi quadratici medi delle due distribuzioni risultino quanto più simili. Le funzioni ottenute sono state chiaramente normalizzate al numero di protoni. Come si può osservare, il fit di Fermi si discosta dalle densità gaussiane principalmente per piccoli r , dove tuttavia le informazioni sperimentali sono poco accurate e quindi è permessa una certa libertà. Al contrario i raggi quadratici medi delle distribuzioni, che definiscono essenzialmente i raggi dei nuclei, risultano ben riproducibili con scarti assoluti sulla seconda cifra decimale. Unica eccezione l'elio, la cui forma gaussiana molto piccata risulta difficilmente riproducibile attraverso una funzione di Fermi a due parametri.

²Ci si è serviti nuovamente del software ROOT

Lo scopo è di indagare i diversi comportamenti del potenziale in dipendenza della funzione usata come fit per i dati sperimentali.

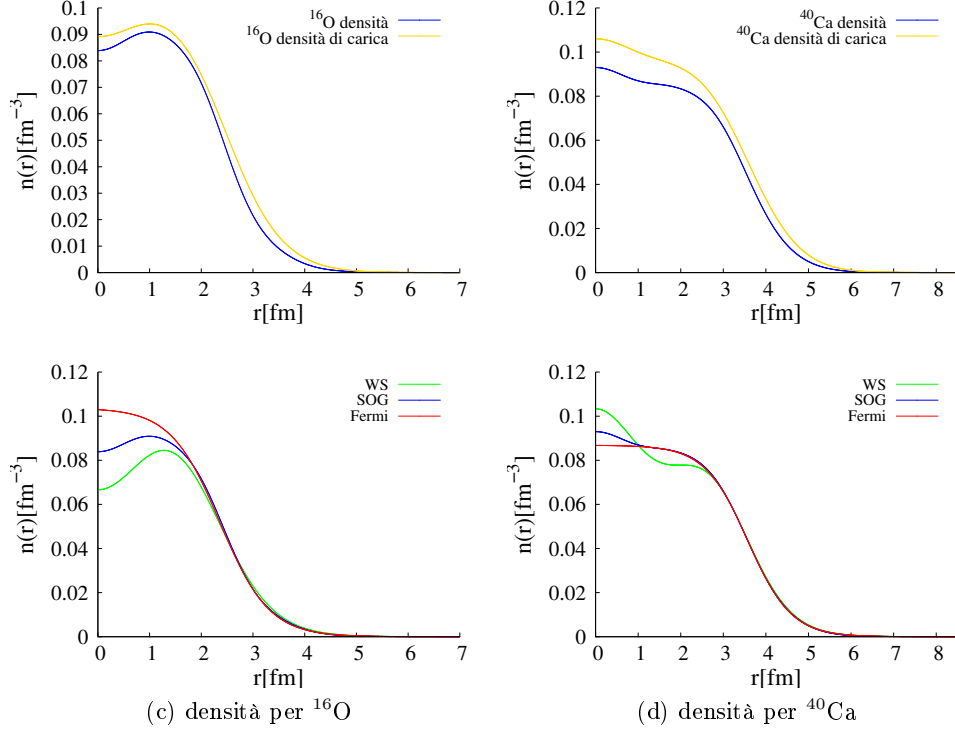


Figura 4.3: Densità parte 2.

Nei grafici di ^{16}O e ^{40}Ca sono state aggiunte le densità ottenute con potenziale il di Woods-Saxon (3.15) già usato per ricavare gli spettri del capitolo precedente come termine di paragone. Per ragioni che saranno più chiare in seguito, risulta utile evidenziare le densità relative a ^{16}O e ^{40}Ca anche in scala logaritmica, raffigurati rispettivamente in fig. 4.5 e fig. 4.4. E' possibile osservare come, grazie alla diversa scala adottata, l'andamento della curva parametrizzata attraverso una somma di gaussiane risulta assai differente dalle altre per grandi r . Si procede ora all'analisi dei potenziali ricavati per le specie ^{16}O e ^{40}Ca .

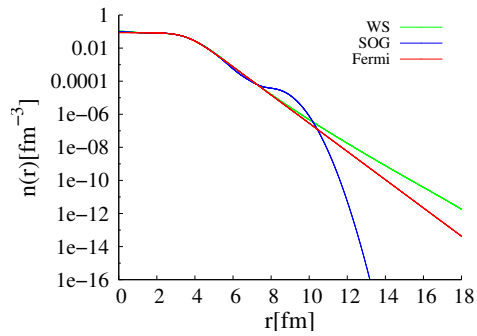


Figura 4.4: densità per il ^{40}Ca in scala logaritmica.

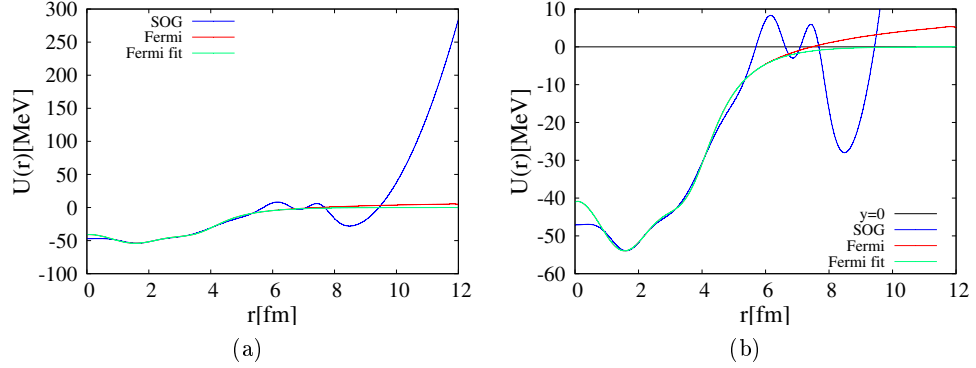


Figura 4.6: Potenziali ricostruiti per il ^{40}Ca da densità empiriche; sulla sinistra un'immagine allargata per mostrare gli andamenti globali, sulla destra è invece possibile osservare il dettaglio delle diverse curve.

4.4 I potenziali efficaci

In linea di principio il potenziale efficace di campo medio deve andare a 0 per $r \rightarrow +\infty$ al massimo come $1/r$, ovvero per grandi r ci aspettiamo di vedere soltanto il contributo del termine coulombiano. Nello specifico gli output dell'algoritmo sono stati corretti sottraendo al potenziale trovato il termine coulombiano calcolato tramite l'equazione (3.20) a partire dalla densità di riferimento. In questo modo è possibile studiare il solo termine centrale senza interazione elettromagnetica o spin-orbita. Quest'ultima in particolare non è rilevabile dal potenziale finale poiché si stanno trattando nuclei saturati in spin, per cui i contributi derivanti dai partner spin-orbita (ovvero dei livelli con $j = l \pm 1/2$) si compensano. Il potenziale coulombiano e l'interazione spin-orbita possono essere aggiunti perturbativamente in seguito (come si è fatto per il caso del potenziale Woods-Saxon (3.15)) per calcolare lo spettro corretto associato al potenziale totale.

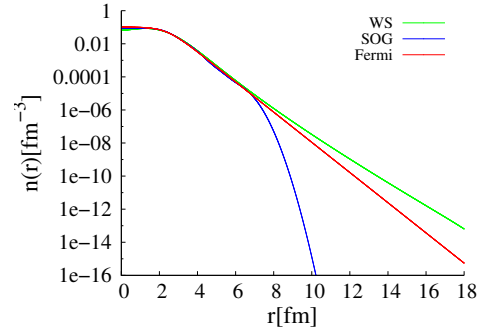


Figura 4.5: densità per il ^{16}O in scala logaritmica.

Nell'esporre le osservazioni e i risultati verrà preso come esempio il ^{40}Ca , ma le stesse argomentazioni valgono anche per il ^{16}O . Dal grafico in figura 4.6(a) risalta immediatamente che il potenziale "SOG", relativo alla densità in blu di figura 4.3(c), diverge molto velocemente, un risultato chiaramen-

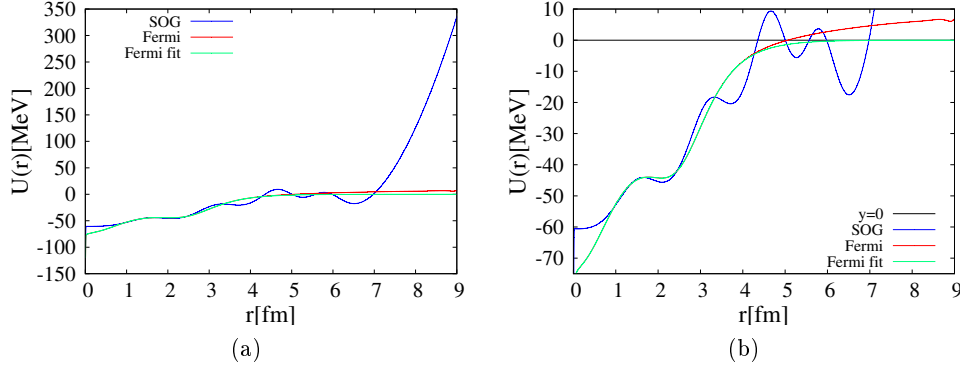


Figura 4.7: Potenziali ricostruiti per il ^{16}O da densità empiriche; sulla sinistra un'immagine allargata per mostrare gli andamenti globali, sulla destra è invece possibile osservare il dettaglio delle diverse curve.

te senza significato fisico. E' spontaneo domandarsi da dove derivi questo problema, se si tratti di un errore puramente numerico o meno. Testando l'algoritmo iterativo su una densità di tipo WS a partire da un potenziale anch'esso di tipo WS, ma leggermente modificato, si riesce a risalire perfettamente al potenziale originale. Il problema deve risiedere allora nell'input dell'iterazione.

Se si osserva con attenzione l'immagine 4.6(a), si può notare come il potenziale SOG presenti un andamento curiosamente parabolico. Ciò in realtà non solo non è assurdo, ma era bensì prevedibile già prima di effettuare la simulazione. Dalla meccanica quantistica è noto che a un'Hamiltoniana di potenziale armonico sono associate autofunzioni di tipo gaussiano. Ma il ragionamento è vincolante anche nel senso opposto: partendo da una densità gaussiana si deve risalire necessariamente a un potenziale di tipo armonico. Il presente calcolo non è che una dimostrazione di questa relazione biunivoca.

Da ciò si può concludere che le densità definite da (4.13) possono essere utilizzate per descrivere le proprietà nucleari nella parte interna e sulla superficie del nucleo ma si tratta di una parametrizzazione inadeguata per le code della distribuzione.

Il potenziale associato alla densità parametrizzata dalla funzione di Fermi è rappresentato dalla curva in rosso nelle immagini di figura 4.6. Anche in questo caso si osserva quella che sembra essere una leggera divergenza del potenziale. In realtà, come si mostra in figura 4.8, la curva si assesta attorno a un valore finito, cioè presenta un asintoto orizzontale che tuttavia non è lo 0. Si potrebbe pensare che il motivo sia attribuibile ad una semplice costante additiva, ma questa ipotesi è confutata dal fatto che gli autovalori associati al potenziale sono coerenti con quelli già trovati per il WS. In realtà la spiegazione è analoga a quella già usata per il potenziale associato alla distribuzione SOG.

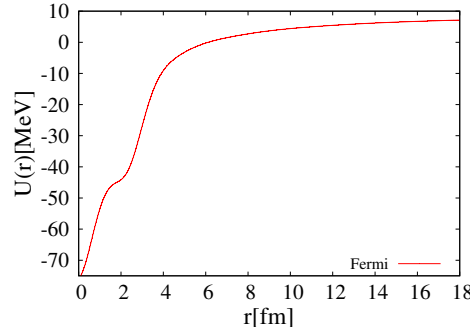


Figura 4.8: Potenziale di Fermi per il ^{16}O fino a 20 fm.

ora nuovamente le densità associate al ^{40}Ca , ma ora in figura 4.4; grazie alla scala logaritmica, risultano evidenti le differenze fra la funzione di Fermi, in rosso, e la densità WS, in verde. Questa è associata ad un potenziale che va a 0 per costruzione. Pertanto è sensato che la densità descritta dalla funzione di Fermi, in quanto più smorzata rispetto a quella WS, sia associata a una buca più profonda. Anche la spiegazione di questo comportamento non è casuale.

La densità WS è costruita come somma dei moduli quadri delle autofunzioni di particella singola, ciascuna della quali presenta, per grandi r , un diverso smorzamento esponenziale. La coda, in particolare, è dominata dall'autofunzione meno smorzata e che va a 0 più lentamente: il tratto visibile in verde in figura 4.4 rappresenta essenzialmente l'andamento dell'orbitale più esterno. La parametrizzazione di Fermi invece dipende solo da due parametri ed è stata fittata in modo da riprodurre principalmente il raggio quadratico medio. Pertanto risulta naturale che la coda, regolata dal solo coefficiente c_2 , non sia in grado di riprodurre il comportamento desiderato anche per grandi r .

Il modo più immediato per ovviare alla non fisicità del risultato consiste nel correggere direttamente il potenziale ottenuto, modificando la coda e imponendo che vada a 0 esponenzialmente. Il risultato è mostrato in figura 4.6 dalla curva in verde. Questa procedura è legittima solo se le osservabili non cambiano apprezzabilmente. In particolare si osserva che le densità rimangono perfettamente sovrapponibili e gli autovalori più "profondi" cambiano in modo appena percepibile. Come si mostra in tabella 4.1, gli autovalori corrispondenti nelle colonne *SOG*, *Fermi* e *FermiFit* presentano scarti dell'ordine della decina di KeV.

Un'altra procedura si basa invece sulla modifica della densità sperimentale. Una possibilità consiste nell'aggiungere alla distribuzione di Fermi un'ulteriore funzione di Fermi di modo che il raggio quadratico medio della distri-

In questo caso la relazione biunivoca si ha fra buca di potenziale finita e autofunzioni con decadimento esponenziale. Le funzioni di Fermi, per $r \gg c_1$ (ref. (4.17)), presentano appunto questo andamento e di conseguenza, per gli stessi valori di r , ci si aspetta che il potenziale associato tenda a una buca finita. Per l'esattezza il legame si ha tra altezza della buca e coefficiente di smorzamento dell'esponente, ovvero il termine c_2 in riferimento a (4.17). Si osservino

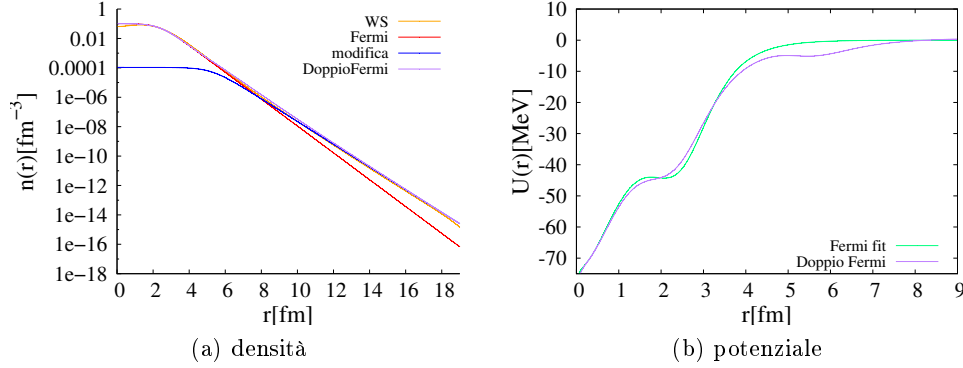


Figura 4.9: Raffronto fra il potenziale interpolato e il potenziale associato alla densità descritta da due funzioni di Fermi.

buzione totale non cambi ma si vada a correggere l'andamento della coda. Ciò si può realizzare imponendo che il parametro c'_0 della nuova Fermi sia una frazione infinitesima di c_0 e la diffusività c'_2 sia maggiore rispetto a quella della distribuzione di partenza. In questo modo si ottiene che l'apporto della nuova distribuzione è praticamente nullo per piccoli r , ma si trovi a dominare l'andamento della densità per r grandi. Una possibile realizzazione per questo tipo di correzione è mostrata in figura 4.9(a) per l' ^{16}O . La Fermi correttiva (in blu) è caratterizzata da una coda fittata su una densità WS (in arancio). La linea rossa rappresenta la densità di Fermi originale, mentre la linea viola rappresenta la distribuzione totale. Come si può notare la nuova densità percorre per il primo tratto la curva di partenza, mentre al crescere di r segue l'andamento dato dalla correzione.

Nell'immagine 4.9(b) sono raffigurati il potenziale associato alla densità di Fermi corretto a posteriori e quello relativo alla densità data dalla somma delle due distribuzioni di Fermi. Si nota come il nuovo potenziale converga a 0 ma presenti delle oscillazioni nell'intervallo in cui la correzione inizia ad essere dominante. Come conseguenza si ha una variazione sugli autovalori di singola particella più marcata rispetto a quella ottenuta con la semplice modifica della coda del potenziale. Lo stesso tipo di fit è stato tentato anche per il ^{40}Ca , tuttavia i potenziali ricavati presentano oscillazioni ancora più pronunciate in corrispondenza delle giunzioni con la funzione di Fermi correttiva. Risulta allora necessario migliorare la procedura di fit, andando ad introdurre altre correzioni successive, idealmente una funzione di Fermi per ciascun autovalore di singola particella. In questo modo si andrebbe a riprodurre quasi perfettamente la coda della densità.

In conclusione è possibile affermare che l'inversione delle equazioni di Kohn-Sham permette di ricostruire, in questa casistica molto semplificata,

un potenziale efficace di campo medio. In particolare si è osservato che le densità di carica fornite dall'articolo [25] conducono a dei potenziali accettabili per quanto riguarda il bulk e la superficie nucleare. Tuttavia le parametrizzazioni consigliate presentano problemi in relazione alle code delle distribuzioni: uno smorzamento troppo accentuato delle densità porta a potenziali che divergono oppure che presentano un asintoto diverso dallo 0. Come si è visto questo problema può essere risolto andando a modificare arbitrariamente le densità (o i potenziali stessi) a patto di non variare le proprietà osservabili del sistema. Gli autovalori associati ai potenziali ricostruiti, come mostrato nella tabella 4.1, risultano in buon accordo tra loro. Lo scarto più pronunciato di questi autovalori nei confronti dei dati sperimentali e degli autovalori associati al potenziale di Woods-Saxon era invece prevedibile. Innanzitutto perché gli autovalori di particella singola indipendente associati agli orbitali di KS non coincidono con le energie degli stati legati rilevati dagli esperimenti. Inoltre le misure dirette sono affette da frammentazione, dal momento che la cattura o l'emissione di nucleoni negli esperimenti di transfer non avviene in corrispondenza di picchi discreti di energia ma lungo una distribuzione continua più o meno piccata su certi valori. Per quanto riguarda gli autovalori di Woods-Saxon, questi devono essere considerati solo dei riferimenti qualitativi, dal momento che si tratta di un potenziale empirico e per di più tarato per riprodurre osservabili su un ampio numero di nuclei, specialmente quelli pesanti.

	<i>orb</i>	<i>WS</i>	<i>SOG</i>	<i>Fermi</i>	<i>FermiFit</i>	<i>DoppioFermi</i>	<i>Esp</i>
⁴⁰ Ca	<i>1s</i> _{1/2}	-30.46	-30.66	-30.62	-30.62	—	—
	<i>1p</i> _{3/2}	-21.69	-21.52	-21.51	-21.51	—	—
	<i>1p</i> _{1/2}	-19.02	-18.91	-18.90	-18.90	—	—
	<i>1d</i> _{5/2}	-12.27	-11.70	-11.71	-11.71	—	-15.07
	<i>2s</i> _{1/2}	-8.31	-7.69	-7.70	-7.71	—	-10.92
	<i>1d</i> _{3/2}	-6.89	-6.37	-6.39	-6.39	—	-8.33
	<i>1f</i> _{7/2}	-2.51	-1.72	-1.75	-1.77	—	-1.09
¹⁶ O	<i>1s</i> _{1/2}	-27.27	-27.75	-28.08	-28.08	-28.15	—
	<i>1p</i> _{3/2}	-15.13	-14.64	-14.59	-14.62	-14.28	—
	<i>1p</i> _{1/2}	-10.00	-9.48	-9.39	-9.44	-9.18	-12.13
	<i>1d</i> _{5/2}	-3.25	-2.04	-1.59	-1.77	-2.01	-0.60
	<i>2s</i> _{1/2}	-1.10	—	—	—	-1.59	-0.11

Tabella 4.1: Autovalori di singolo protone per il ⁴⁰Ca e ¹⁶O, associati a diversi potenziali. I dati nell'ultima colonna sono relativi ai risultati sperimentali riportati in [26].

Capitolo 5

Conclusioni

Come già anticipato nell'introduzione, si è trattato di un elaborato volto ad esplorare una via che non era mai stata tentata in precedenza per quanto riguarda lo studio del nucleo atomico. Tuttavia l'inversione in ambito nucleare delle equazioni di Kohn-Sham per ricavare un potenziale consistente con la densità misurata sperimentalmente ha portato già a risultati ragionevoli.

Si è verificato, tramite la costruzione dei potenziali di KS associati a diverse parametrizzazioni delle densità sperimentali, come l'inversione non sia ovvia e immediata. In particolare si sono riscontrate difficoltà nell'utilizzo dei dati sperimentali presenti in letteratura. Nello specifico si è osservato che non si hanno misure sufficientemente precise per determinare con sicurezza l'andamento della densità in prossimità del centro del nucleo. Similmente i dati sperimentali, dove la densità risulta infinitesima, non sono in grado di determinarne con precisione l'asintotica per grandi r , fatto che ha determinato il comportamento divergente per i primi potenziali calcolati. Imponendone successivamente la convergenza è stato possibile ottenere dei potenziali fisicamente significativi. E' stata inoltre esposta una procedura molto semplice per modificare le densità sperimentali e costruire densità empiriche che conducano a siffatti potenziali. Attraverso il confronto gli autovalori di particella singola si è mostrato che, una volta corrette le code delle distribuzioni delle densità, la forma funzionale della distribuzione utilizzata non è molto influente.

Nonostante le semplificazioni introdotte, si può concludere che il metodo è stato collaudato con successo dal momento che ha portato alla costruzione di potenziali paragonabili con altri risultati empirici. Restano tuttavia numerosi problemi aperti. Un primo passo avanti nell'accuratezza dei potenziali ricavati potrebbe essere ottenuto andando a perfezionare la forma delle densità di input imponendo una corretta asintotica alle code. In secondo luogo il calcolo dell'osservabile principe, ovvero l'energia di legame totale. Essa,

nel formalismo della DFT, è espressa da

$$E_{legame} = \sum_i \varepsilon_i + E_{XC} - \int d^3r V(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}), \quad (5.1)$$

dove gli ε_i sono gli autovalori associati agli orbitali di KS, $V(\mathbf{r})$ il potenziale efficace di KS e E_{XC} l'energia di scambio e correlazione. Il primo e il terzo termine della (5.1) sono facilmente calcolabili, il problema consiste nel determinare E_{XC} , ovvero capire come invertire la (2.27), senza la quale risulta impossibile calcolare l'energia di legame.

Un possibile miglioramento della procedura utilizzata può consistere nell'estendere il calcolo alle singole autofunzioni e tenere così in considerazione esplicitamente l'effetto di spin-orbita, andando a ricostruire un potenziale efficace diverso per ciascuna autofunzione. Il passo ancora successivo potrebbe consistere nel rinunciare alla simmetria sferica, sviluppare il problema tridimensionale nella sua interezza ed estendere notevolmente il numero dei nuclei analizzabili.

Appendice A

La simmetria sferica

Poiché si è deciso di risolvere il problema in simmetria sferica avendo in mente il caso di nuclei sferici, è opportuno ricordare le semplificazioni che questa scelta comporta.

A.1 Gli operatori e le autofunzioni

In coordinate sferiche l'operatore laplaciano è comodamente scrivibile come somma di un contributo radiale e di uno angolare. Nello specifico si ha

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{L^2}{r^2} \quad (\text{A.1})$$

e la principale conseguenza di questa scomposizione consiste nel fatto che la funzione d'onda spaziale può essere fattorizzata in parte radiale e in parte angolare

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (\text{A.2})$$

dove le $Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$ sono le armoniche sferiche e hanno la seguente forma:

$$Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) = (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m_l)!}{4\pi(l+m_l)!}} P_l^{m_l}(\cos \vartheta) e^{im_l \varphi}. \quad (\text{A.3})$$

I $P_l^m(\cos \vartheta)$ sono i polinomi di Legendre. Tutta la dipendenza dalle coordinate angolari (ϑ, φ) è contenuta nelle armoniche sferiche che sono le autofunzioni (nello spazio delle coordinate) dell'operatore L^2 a cui è associato l'autovalore $\hbar^2 l(l+1)$. Per le armoniche sferiche vale la relazione di ortonormalità

$$\iint d\cos \vartheta d\varphi Y_{l'm_l'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l'}. \quad (\text{A.4})$$

Tenendo conto anche della parte di funzione d'onda legata allo spin (ma tralasciando l'isospin), la (A.2) diventa

$$\Psi(\mathbf{r}, \sigma) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \chi(\sigma). \quad (\text{A.5})$$

Accoppiando momento angolare e momento intrinseco questa espressione può essere riscritta come

$$R_{nl}(r)\mathcal{Y}_{ljm_j}(\vartheta, \varphi, \sigma), \quad (\text{A.6})$$

dove

$$\mathcal{Y}_{ljm_j}(\vartheta, \varphi, \sigma) = \sum_{m_l, m_s} \langle l \ 1/2 \ m_l \ m_s | l \ 1/2 \ j \ m_j \rangle Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \chi_{m_s}(\sigma). \quad (\text{A.7})$$

Il braket presente nel membro destro dell'equazione (A.7) rappresenta i necessari coefficienti di Clebsch-Gordan che permettono di passare dalla base disaccoppiata a quella accoppiata, in cui troviamo un momento angolare totale j e i relativi momenti magnetici m_j .

Per la componente radiale delle autofunzioni vale la seguente definizione

$$R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r}. \quad (\text{A.8})$$

In questo modo l'azione del laplaciano sulla coordinata radiale viene notevolmente facilitata, ottenendo un'equazione di Schrödinger monodimensionale per la funzione $u(r)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r). \quad (\text{A.9})$$

A.2 Semplificazione della densità

Riassumiamo le relazioni appena trovate per le autofunzioni in simmetria sferica

$$R_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r} \quad (\text{A.10})$$

$$\mathcal{Y}_{ljm_j}(\vartheta, \varphi, \sigma) = \sum_{m_l, m_s} \langle l \ m_l \ 1/2 \ m_s | j \ m_j \rangle Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) \chi_{m_s}(\sigma) \quad (\text{A.11})$$

$$\Psi(\mathbf{r}, \sigma) = R_{nl}(r)\mathcal{Y}_{ljm}(\vartheta, \varphi, \sigma) \quad (\text{A.12})$$

Nel caso di shell chiuse la densità si può riscrivere come

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \sum_{\sigma} \sum_i \Psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \Psi_i(\mathbf{r}, \sigma) \\ &= \sum_i \frac{u_i^2(r)}{r^2} \sum_{\substack{m_l, m_s \\ m_{l'}, m_{s'}}} \langle l \ m_l \ 1/2 \ m_s | j \ m_j \rangle \langle l \ m_{l'} \ 1/2 \ m_{s'} | j \ m_j \rangle \\ &\quad Y_{l, m_l}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l, m_{l'}}(\vartheta, \varphi) \sum_{\sigma} \chi_{1/2, m_s}^*(\sigma) \chi_{1/2, m_{s'}}(\sigma) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

dove l'indice i è (n, l, j, m_j) . Per le autofunzioni di spin, utilizzando la relazione di completezza e l'ortonormalità, vale che

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \chi_{1/2, m_s}^*(\sigma) \chi_{1/2, m_{s'}}(\sigma) &= \sum_{\sigma} \langle 1/2 m_s | \sigma \rangle \langle \sigma | 1/2 m_{s'} \rangle d\sigma \\ &= \langle 1/2 m_s | 1/2 m_{s'} \rangle = \delta_{m_s, m_{s'}}. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

La delta risultante agisce in (A.13) riassorbendo la sommatoria su $m_{s'}$. I coefficienti di Clebsh-Gordan possono essere riarrangiati come segue

$$\langle l m_l 1/2 m_s | j m_j \rangle = (-1)^{l-j+m_s} \frac{\sqrt{2j+1}}{\sqrt{2l+1}} \langle j m_j 1/2 -m_s | l m_l \rangle, \quad (\text{A.15})$$

da cui

$$\begin{aligned} &\langle l m_l 1/2 m_s | j m_j \rangle \langle l m_{l'} 1/2 m_s | j m_j \rangle \\ &= \frac{2j+1}{2l+1} \langle j m_j 1/2 -m_s | l m_l \rangle \langle j m_j 1/2 -m_s | l m_{l'} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Vale inoltre la seguente relazione di completezza, poiché m_s e m_j corrono lungo tutti i valori possibili

$$\begin{aligned} \sum_{m_s, m_j} \langle l m_l | j m_j 1/2 -m_s \rangle \langle j m_j 1/2 -m_s | l m_{l'} \rangle \\ = \langle l m_l | l m_{l'} \rangle = \underbrace{\delta_{l, l'}}_{=\mathbb{I}} \delta_{m_l, m_{l'}}. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Con questo passaggio anche le sommatorie su $m_s, m_j, m_{l'}$ vengono riassorbite. Si ottiene dunque che

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \sum_{m_l} \frac{u_{\alpha}^2(r)}{r^2} \frac{2j+1}{2l+1} Y_{l, m_l}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l, m_l}(\vartheta, \varphi), \quad (\text{A.18})$$

con $\alpha \equiv (n, l, j)$. La sommatoria su m_l si risolve in un semplice coefficiente $2l+1$ che si semplifica con quello al denominatore. Integrando poi le armoniche sferiche sull'intero angolo solido si ha

$$\int Y_{l, m_l}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l, m_l}(\vartheta, \varphi) d\Omega = 4\pi \delta_{l, l} \delta_{m_l, m_l}. \quad (\text{A.19})$$

Si giunge allora alla definitiva scrittura

$$\rho(r) = \sum_{\alpha} \frac{u_{\alpha}^2(r)}{r^2} \frac{2j+1}{4\pi}. \quad (\text{A.20})$$

A.3 Applicazione dell'operatore laplaciano per ricavare il potenziale

Partendo ancora dalle equazioni (A.10), (A.11), (A.12) e raccogliendo $i \equiv (n, l, j, m_j)$, il secondo termine a numeratore dell'equazione (3.4) ha la seguente forma

$$\begin{aligned}
 & \sum_i \frac{1}{\varepsilon_i} \Psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \Psi_i(\mathbf{r}) \\
 &= \sum_i \frac{1}{\varepsilon_i} \sum_{\substack{m_l, m_s \\ m_{l'}, m_{s'}}} \langle l m_l 1/2 m_s | j m_j \rangle \langle l m_{l'} 1/2 m_{s'} | j m_j \rangle \\
 & \quad \frac{u_i(r)}{r} Y_{l, m_l}^*(\vartheta, \varphi) \nabla^2 \left[\frac{u_i(r)}{r} Y_{l, m_{l'}}(\vartheta, \varphi) \underbrace{\sum_{\sigma} \chi_{1/2, m_s}^*(\sigma) \chi_{1/2, m_{s'}}(\sigma)}_{= \delta_{m_s, m_{s'}}} \right]. \tag{A.21}
 \end{aligned}$$

La delta dell'ultimo termine riassume la sommatoria su $m_{s'}$. Utilizzando l'espressione del laplaciano in coordinate sferiche, secondo cui

$$\begin{aligned}
 & \nabla^2 \left[\frac{u(r)}{r} Y_{l, m_{l'}}(\vartheta, \varphi) \right] \\
 &= \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \right) \left[\frac{u(r)}{r} Y_{l, m_{l'}}(\vartheta, \varphi) \right] \\
 &= Y_{l, m_{l'}}(\vartheta, \varphi) \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) - \frac{u(r)}{r^3} l(l+1) \right) \tag{A.22}
 \end{aligned}$$

e riprendendo le equazioni (A.15), (A.16), (A.17) e (A.19), si giunge alla seguente espressione per la (A.21)

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{\varepsilon_{\alpha}} \frac{2j+1}{4\pi} \left[\frac{u_{\alpha}(r)}{r^2} \frac{\partial^2 u_{\alpha}(r)}{\partial r^2} - \frac{u_{\alpha}^2(r)}{r^4} l(l+1) \right], \tag{A.23}$$

con $\alpha \equiv (n, l, j)$.

Appendice B

Richiami di analisi funzionale

Un funzionale è un operatore che associa un numero reale o complesso a una funzione (o a un set di funzioni) di una o più variabili:

$$f_i(x) \text{ o } f_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \xrightarrow{\text{regola}} F[f_1, f_2, \dots, f_n] \quad (\text{B.1})$$

Qui siamo interessati essenzialmente all'applicazione della derivata funzionale, per ulteriori dettagli si rimanda alla Ref. [27].

Se un funzionale può essere scritto come integrale di una funzione, cioè

$$F[f(x)] = \int dx \mathcal{F}(x), \quad (\text{B.2})$$

allora vale che

$$\frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(x)} = \frac{\partial \mathcal{F}(x)}{\partial x} \quad (\text{B.3})$$

Appendice C

Fourier

C.1 La trasformata in simmetria sferica

Ponendo l'asse $z = r \cos \vartheta$ lungo la direzione di $\mathbf{q}$, vale che

$$\begin{aligned} F(\mathbf{q}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r \, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) \\ &= \int dr \, d\Omega \, f(r) e^{-iqr \cos \vartheta} r^2 \sin \vartheta \\ &= 2\pi \int_0^\infty dr \, r^2 f(r) \int_{-1}^1 d \cos \vartheta \, e^{iqr \cos \vartheta} \\ &= 4\pi \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{q} r f(r) dr \equiv \tilde{f}(q), \end{aligned} \tag{C.1}$$

dove si è usato che

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 d\mu \, e^{-iqr\mu} &= \left[\frac{e^{iqr\mu}}{iqr} \right]_{-1}^1 = \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr} \\ &= 2j_0(qr) = 2 \frac{\sin(qr)}{qr}. \end{aligned} \tag{C.2}$$

C.2 La trasformata della densità di carica

Il calcolo seguente mostra esplicitamente come trasformare la densità di carica, dividere per il fattore di forma del protone e antitrasformare per trovare la densità di protoni. Si parta da

$$\rho_{ch}(r) = \underbrace{\frac{1}{2\pi^{3/2}\gamma^3}}_{=C} \sum_i A_i \left[e^{-\left(\frac{r-R_i}{\gamma}\right)^2} + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\gamma}\right)^2} \right], \tag{C.3}$$

Usando il risultato della (4.9), si ha che

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}_{ch}(q) &= 4\pi \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{q} r \rho(r) dr \\
&= 4\pi C \sum_i A_i \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{q} r \left[e^{-\left(\frac{r-R_i}{\gamma}\right)^2} + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\gamma}\right)^2} \right] dr \\
&= -\frac{4\pi C}{q} \frac{\partial}{\partial q} \sum_i A_i \int_0^\infty \cos(qr) \left[e^{-\left(\frac{r-R_i}{\gamma}\right)^2} + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\gamma}\right)^2} \right] dr \\
&= -\frac{1}{2} \frac{4\pi C}{q} \frac{\partial}{\partial q} \sum_i A_i \int_{-\infty}^{+\infty} \cos(qr) \left[e^{-\left(\frac{r-R_i}{\gamma}\right)^2} + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\gamma}\right)^2} \right] dr \\
&= -\frac{4\pi C}{2q} \sum_i A_i \frac{\partial}{\partial q} \left[2\gamma\sqrt{\pi} e^{-\frac{\gamma^2 q^2}{4}} \cos(qR_i) \right] \\
&= 4\gamma\pi^{3/2} e^{-\frac{\gamma^2 q^2}{4}} C \sum_i A_i \left[\frac{\gamma^2}{2} \cos(qR_i) + \frac{R_i}{q} \sin(qR_i) \right] \\
&= e^{-\frac{\gamma^2 q^2}{4}} \sum_i A_i \left[\cos(qR_i) + \frac{2R_i}{q\gamma^2} \sin(qR_i) \right].
\end{aligned} \tag{C.4}$$

Si è sfruttato che

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^\infty \cos(qR_i) e^{-\left(\frac{r \pm R_i}{\gamma}\right)^2} dr &= \left\{ \frac{r \pm R_i}{\gamma} = u \rightarrow r = \gamma u \mp R_i, \ dr = \gamma du \right\} \\
&= \gamma \int_{-\infty}^\infty \cos[q(\gamma u \mp R_i)] e^{-u^2} du \\
&= \frac{\gamma}{2} \int_{-\infty}^\infty [e^{iq(\gamma u \mp R_i)} + e^{-iq(\gamma u \mp R_i)}] e^{-u^2} du \\
&= \gamma\sqrt{\pi} e^{-\frac{\gamma^2 q^2}{4}} \cos(qR_i),
\end{aligned} \tag{C.5}$$

dove

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^\infty [e^{\pm iq(\gamma u \pm R_i)}] e^{-u^2} du \\
&= \left\{ \pm iq\gamma u \pm iqR_i - u^2 = -\left(u \mp \frac{i\gamma q}{2}\right)^2 - \frac{\gamma^2 q^2}{4} \pm iqR_i \right\} \\
&= e^{-\frac{\gamma^2 q^2}{4}} e^{\pm iqR_i} \int_{-\infty}^\infty e^{(u \mp \frac{i\gamma q}{2})^2} du \\
&= \sqrt{\pi} e^{-\frac{\gamma^2 q^2}{4}} e^{\pm iqR_i}
\end{aligned} \tag{C.6}$$

C.3 L'antitrasformata

La deconvoluzione fra la trasformata della densità di carica e il fattore di forma del protone, nello spazio di Fourier, diventa un semplice rapporto, per cui si ha che

$$\tilde{\rho}(q) = \frac{\tilde{\rho}_{ch}(q)}{\tilde{\rho}_{protone}(q)} = e^{-\frac{\beta^2 q^2}{4}} \sum_i A_i \left[\cos(qR_i) + \frac{2R_i}{q\gamma^2} \sin(qR_i) \right], \quad (C.7)$$

dove

$$\beta = \sqrt{\gamma^2 - \alpha^2}. \quad (C.8)$$

Usando la (4.10) si ha che

$$\begin{aligned} \rho(r) &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{r} q \tilde{\rho}(q) dq \\ &= \frac{1}{2\pi^2 r} \sum_i A_i \int_0^\infty \sin(qr) q e^{-\frac{\beta^2 q^2}{4}} \left[\cos(qR_i) + \frac{2R_i}{q\gamma^2} \sin(qR_i) \right] \\ &= \frac{1}{2\pi^2 r} \sum_i A_i \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{\beta^3} \left[(r+R_i) e^{-\left(\frac{r+R_i}{\beta}\right)^2} + (r-R_i) e^{-\left(\frac{r-R_i}{\beta}\right)^2} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sqrt{\pi} R_i}{\beta\gamma^2} \left[e^{-\left(\frac{r-R_i}{\beta}\right)^2} - e^{-\left(\frac{r+R_i}{\beta}\right)^2} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi^{3/2} r} \sum_i A_i \left\{ e^{-\left(\frac{r-R_i}{\beta}\right)^2} \left[\frac{r+R_i}{\beta^3} - \frac{R_i}{\beta\gamma^2} \right] + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\beta}\right)^2} \left[\frac{r-R_i}{\beta^3} + \frac{R_i}{\beta\gamma^2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (C.9)$$

Dove sono state usate le seguenti relazioni:

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \sin(qr) \cos(qR_i) q e^{-\frac{\beta^2 q^2}{4}} dq \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} \int_{-\infty}^\infty \sin(qr) \cos(qR_i) e^{-\frac{\beta^2 q^2}{4}} dq \\ &= -\frac{1}{8} \frac{\partial}{\partial r} \int_{-\infty}^\infty \left[e^{iq(r+R_i)} + e^{-iq(r+R_i)} + e^{iq(r-R_i)} + e^{-iq(r-R_i)} \right] e^{-\frac{\beta^2 q^2}{4}} dq \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{\beta} \left[e^{-\left(\frac{r+R_i}{\beta}\right)^2} + e^{-\left(\frac{r-R_i}{\beta}\right)^2} \right] \right\} \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{\beta^3} \left[(r+R_i) e^{-\left(\frac{r+R_i}{\beta}\right)^2} + (r-R_i) e^{-\left(\frac{r-R_i}{\beta}\right)^2} \right], \end{aligned} \quad (C.10)$$

e

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty \sin(qr) \frac{2R_i}{\gamma^2} \sin(qR_i) e^{-\frac{\beta^2 q^2}{4}} dq \\
&= \frac{R_i}{\gamma^2} \int_{-\infty}^\infty \sin(qr) \sin(qR_i) e^{-\frac{\beta^2 q^2}{4}} dq \\
&= -\frac{R_i}{4\gamma^2} \int_{-\infty}^\infty \left[e^{iq(r+R_i)} + e^{-iq(r+R_i)} - e^{iq(r-R_i)} - e^{-iq(r-R_i)} \right] e^{-\frac{\beta^2 q^2}{4}} dq \\
&= \frac{\sqrt{\pi} R_i}{\beta \gamma^2} \left[e^{-\left(\frac{r-R_i}{\beta}\right)^2} - e^{-\left(\frac{r+R_i}{\beta}\right)^2} \right],
\end{aligned} \tag{C.11}$$

dove

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^\infty e^{\pm iq(r \pm R_i)} e^{-\frac{\beta^2 q^2}{4}} dq \\
&= \int_{-\infty}^\infty e^{-\left(\frac{q\beta}{2} \pm i \frac{r \pm R_i}{\beta}\right)^2} e^{-\left(\frac{r \pm R_i}{\beta}\right)^2} dq \\
&= \frac{2\sqrt{\pi}}{\beta} e^{-\left(\frac{r \pm R_i}{\beta}\right)^2}.
\end{aligned} \tag{C.12}$$

Bibliografia

- [1] Yue Wang e Robert G. Parr. «Construction of exact Kohn-Sham orbitals from a given electron density». In: *Phys. Rev. A* 47 (3 1993), R1591–R1593.
- [2] E. Epelbaum, H.-W. Hammer e Ulf-G. Meißner. «Modern theory of nuclear forces». In: *Rev. Mod. Phys.* 81 (4 2009), pp. 1773–1825.
- [3] P Roy Chowdhury, C Samanta e DN Basu. «Modified Bethe-Weizsäcker mass formula with isotonic shift and new driplines». In: *Modern Physics Letters A* 20.21 (2005), pp. 1605–1618.
- [4] Michael Bender, Paul-Henri Heenen e Paul-Gerhard Reinhard. «Self-consistent mean-field models for nuclear structure». In: *Rev. Mod. Phys.* 75 (1 2003), pp. 121–180.
- [5] A. Nadasen et al. «Elastic scattering of 80-180 MeV protons and the proton-nucleus optical potential». In: *Phys. Rev. C* 23 (3 1981), pp. 1023–1043.
- [6] J. Dechargé e D. Gogny. «Hartree-Fock-Bogolyubov calculations with the *D1* effective interaction on spherical nuclei». In: *Phys. Rev. C* 21 (4 1980), pp. 1568–1593.
- [7] THR Skyrme. «CVII. The nuclear surface». In: *Philosophical Magazine* 1.11 (1956), pp. 1043–1054.
- [8] D. Vautherin e D. M. Brink. «Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction. I. Spherical Nuclei». In: *Phys. Rev. C* 5 (3 1972), pp. 626–647.
- [9] Peter Ring e Peter Schuck. *The Nuclear Many-Body Problem*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1980.
- [10] Peter Ring. «Extended Density Functionals in Nuclear Structure Physics». In: a cura di Georgios A. Lalazissis, Peter Ring e Dario Vretenar. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2004. Cap. 6 Covariant Density Functional Theory and Applications to Finite Nuclei, pp. 175–218.

- [11] T. Duguet. «The Euroschool on Exotic Beams, Vol. IV». In: a cura di Christoph Scheidenberger e Marek Pfützner. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014. Cap. The Nuclear Energy Density Functional Formalism, pp. 293–350.
- [12] P. Hohenberg e W. Kohn. «Inhomogeneous Electron Gas». In: *Phys. Rev.* 136 (3B 1964), B864–B871.
- [13] W. Kohn e L. J. Sham. «Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects». In: *Phys. Rev.* 140 (4A 1965), A1133–A1138.
- [14] Janos Polonyi e Achim Schwenk, cur. *Renormalization Group and Effective Field Theory Approaches to Many-Body Systems*.
- [15] Lucas O. Wagner et al. «Kohn-Sham calculations with the exact functional». In: *Phys. Rev. B* 90 (4 2014), p. 045109.
- [16] R. O. Jones e O. Gunnarsson. «The density functional formalism, its applications and prospects». In: *Rev. Mod. Phys.* 61 (3 1989), pp. 689–746.
- [17] Eberhard Engel. «A Primer in Density Functional Theory». In: a cura di Carlos Fiolhais, Fernando Nogueira e Miguel A. L. Marques. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2003. Cap. Orbital-Dependent Functionals for the Exchange-Correlation Energy: A Third Generation of Density Functionals, pp. 56–122.
- [18] John P. Perdew e Stefan Kurth. «A Primer in Density Functional Theory». In: a cura di Carlos Fiolhais, Fernando Nogueira e Miguel A. L. Marques. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2003. Cap. Density Functionals for Non-relativistic Coulomb Systems in the New Century, pp. 1–55.
- [19] R.M. Dreizler e E.K.U. Gross. *Density Functional Theory, An Approach to the Quantum Many-Body Problem*. Berlin.
- [20] Juoni Suhonen. *From Nucleons to Nucleus*. Springer, 2005.
- [21] J.C. Slater. «A Simplification of the Hartree-Fock Method». In: *Phys. Rev.* 81.3 (1951).
- [22] Francesc Salvat, Aleksander Jablonski e Cedric J. Powell. «elsepa—Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules». In: *Computer Physics Communications* 165.2 (2005), pp. 157–190. ISSN: 0010-4655.
- [23] M. Zalewski et al. «Spin-orbit and tensor mean-field effects on spin-orbit splitting including self-consistent core polarizations». In: *Phys. Rev. C* 77 (2 2008), p. 024316.
- [24] Milton Abramowitz e Irene A. Stegun, cur. *Handbook of mathematical functions*. Dover Publications, 1970.

- [25] H. De Vries, C.W. De Jager e C. De Vries. «Nuclear charge-density-distribution parameters from elastic electron scattering». In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 36.3 (1987), pp. 495 –536. ISSN: 0092-640X.
- [26] N Schwierz, I Wiedenhover e A Volya. «Parameterization of the Woods-Saxon potential for shell-model calculations». In: *arXiv preprint arXiv:0709.3525* (2007).
- [27] Eberhard Engel e R.M. Dreizler. «Density Functional Theory, Theoretical and Mathematical Physics». In: a cura di Carlos Fiolhais, Fernando Nogueira e Miguel A. L. Marques. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011. Cap. Appendices, pp. 403–521.