



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO
FACOLTÀ DI SCIENZE E TECNOLOGIE

CORSO DI LAUREA TRIENNALE IN FISICA

**TEOREMA DEL POTENZIALE ARMONICO
APPLICATO ALLA RISPOSTA NUCLEARE**

Relatore:

Chiar.mo Prof. Gianluca Colò

Correlatore:

Prof. Javier Roca Maza

Tesi di Laurea di:

Silvia Zanoli

Matr. 866308

Anno Accademico 2017/2018

Indice

1	Introduzione	4
2	Modello teorico	7
2.1	Teoria del funzionale densità	7
2.2	Sistemi elettronici	8
2.3	Sistemi nucleari	11
2.3.1	Energia di Hartree-Fock	13
2.3.2	Interazione efficace di Skyrme	14
2.4	Equazioni RPA	16
3	Teorema del potenziale armonico	21
3.1	Teorema HPT	21
3.2	Teorema HPT applicato alla teoria TDLDA	26
4	Teorema HPT applicato al caso nucleare	28
4.1	Obiettivo	28
4.2	Implementazione del codice	30
4.3	Studio delle neutron drops	33
4.4	Verifica dei vincoli HPT nella teoria RPA	40
4.4.1	Energie di eccitazione RPA	40
4.4.2	Densità di transizione	44
5	Conclusioni	49
A	Derivata funzionale	52
B	Approssimazione di Thomas-Fermi	53

Capitolo 1

Introduzione

Il teorema del potenziale armonico [3] (*Harmonic Potential Theorem*, HPT) rappresenta uno dei pochi risultati esatti nello studio delle proprietà dinamiche di un sistema di particelle interagenti. Questo teorema si applica a fermioni della stessa specie confinati in un potenziale armonico e soggetti ad una perturbazione esterna omogenea nello spazio e variabile nel tempo. Conoscendo il ground state del sistema, attraverso il teorema HPT è possibile descrivere in maniera analitica l'evoluzione temporale della sua funzione d'onda. Grazie al suo enorme contributo nello studio di sistemi a molti corpi, il teorema HPT riveste un ruolo fondamentale nelle teorie dipendenti dal tempo di sistemi di particelle interagenti, come la teoria del funzionale densità.

La teoria del funzionale densità nasce con l'obiettivo di descrivere la struttura elettronica di atomi, molecole e solidi ma, in generale, può essere utilizzata per un qualsiasi sistema in cui le componenti siano particelle fermioniche, come i nuclei atomici. La teoria del funzionale densità si basa su due teoremi che Hohenberg e Kohn dimostrarono nel 1964 [13] secondo cui in un sistema di N fermioni interagenti soggetti ad un potenziale esterno esiste una relazione biunivoca tra l'energia del sistema E , definita come un funzionale della densità di particelle ρ , e la densità stessa. L'intera informazione relativa all'energia di un sistema di N fermioni risulta quindi contenuta nella densità a singolo corpo ρ , cioè una funzione reale dipendente da tre coordinate, senza richiedere la conoscenza della funzione d'onda ψ del sistema, rappresentata da una funzione complessa in $3N$ coordinate. Si tratta di una notevole semplificazione del problema studiato, in quanto il numero N di particelle considerate può essere arbitrariamente grande.

Questo elaborato si pone come obiettivo quello di fornire una descrizione

dettagliata e approfondita del teorema del potenziale armonico, mostrando come possa essere applicato ad un sistema di neutroni interagenti confinati in una buca armonica. Seguendo lo schema indicato nell'articolo [3], si mostra a livello analitico come il teorema HPT venga soddisfatto esattamente dalla teoria del funzionale densità dipendente dal tempo in approssimazione locale. La parte centrale di questo studio è volta a fornire una descrizione teorica e una verifica computazionale dell'applicazione del teorema HPT alla versione linearizzata della teoria del funzionale densità dipendente dal tempo, detta, in ambito nucleare, *Random Phase Approximation*, o semplicemente *teoria RPA*.

In questo elaborato vengono analizzati sistemi di neutroni interagenti confinati in un potenziale armonico. Sistemi di questo tipo prendono il nome di *neutron drops*. In letteratura esistono diversi studi [9, 10, 22, 23] in cui vengono descritte le principali proprietà (energie totali, energie di singola particella, raggi quadratici medi, densità,...) delle neutron drops. Si tratta di analisi di fondamentale importanza per lo studio, ad esempio, di nuclei esotici ricchi di neutroni: essendo caratterizzate solo da una interazione neutrone-neutrone, le neutron drops sono un modello semplificato adatto ad investigare nuclei ricchi di neutroni lontani dalla valle di stabilità.

Nel primo capitolo di questo elaborato si riporta un quadro generale della teoria del funzionale densità, mostrando come sia stata elaborata per sistemi elettronici e come sia stato sviluppato il modello Kohn-Sham. Se ne fornisce poi un'applicazione in ambito nucleare, proponendo un'analisi dettagliata della teoria nel limite di piccole ampiezze (teoria RPA).

Il secondo capitolo è incentrato sul teorema del potenziale armonico: si presenta la dimostrazione del teorema per un sistema di nucleoni della stessa specie e si mostra a livello analitico che la teoria del funzionale densità dipendente dal tempo rispetta i vincoli imposti dal teorema HPT.

Il terzo capitolo è volto ad una verifica a livello computazionale del fatto che la teoria RPA soddisfa esattamente il teorema HPT. Lo studio è stato condotto utilizzando il programma *skyrme_rpa* [16] che permette di risolvere in simmetria sferica le equazioni HF-RPA per un sistema di neutroni e/o protoni soggetti ad interazioni di tipo Skyrme. A livello preliminare, per verificare la bontà del programma, sono stati studiati sistemi di neutroni non interagenti in una buca armonica, riconducendosi al problema risolubile analiticamente dell'oscillatore armonico. Successivamente, si è proceduto allo studio delle neutron drops secondo il modello proposto negli articoli di S.Gandolfi [10] e S.Shen [9], fornendo i risultati ottenuti circa le energie totali, energie di singola particella e raggi quadratici medi dei sistemi studiati. L'ultima sezione di questo capitolo è dedicata alla teoria RPA. Il sistema

1. Introduzione

studiato viene perturbato in approssimazione RPA e se ne studia il moto del centro di massa. Si verifica quindi che si tratta di un moto armonico con energia pari a quella della buca di potenziale e che la densità di transizione differisce dal gradiente della densità di ground state solo per una costante moltiplicativa, come imposto dal teorema del potenziale armonico.

Capitolo 2

Modello teorico

2.1 Teoria del funzionale densità

La teoria del funzionale densità nasce con l'obiettivo di descrivere la struttura elettronica di atomi, molecole e solidi nel loro stato fondamentale ma, più in generale, trova applicazione nell'ambito di teorie a molti corpi di fermioni interagenti. La formulazione moderna di questa teoria venne sviluppata negli anni Sessanta a partire dalla pubblicazione da parte di P. Hohenberg e W. Kohn di un importante articolo [13] che diede una svolta fondamentale alle teorie a molti corpi fino ad allora utilizzate. La grande rivoluzione dei due teoremi esposti nell'articolo è data dal fatto che lo studio di un sistema di particelle interagenti possa essere effettuato partendo dalla densità di particelle ρ , senza la necessità di conoscere la funzione d'onda completa del sistema ψ . Si tratta ovviamente di una notevole semplificazione perché si passa dallo studio di una funzione d'onda complessa in $3N$ variabili, con N arbitrariamente grande, ad una funzione reale in tre coordinate.

In questo capitolo si vuole fornire una panoramica generale della teoria del funzionale densità, mostrando come questa venne introdotta nelle teorie multi-corpi di sistemi elettronici. Se ne fornisce poi un'applicazione in ambito nucleare, soffermandosi sulla teoria TDLDA in approssimazione di piccole ampiezze (teoria RPA).

2.2 Sistemi elettronici

Si consideri un sistema di N elettroni descritto dalla seguente Hamiltoniana:

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N V(i, j) + \sum_{i=1}^N V_{ext}(i) \quad (2.1)$$

dove il primo termine rappresenta l'energia cinetica degli elettroni, il secondo il potenziale di interazione tra le particelle e il terzo il potenziale esterno che agisce sugli elettroni. Il potenziale di interazione può essere considerato come la semplice repulsione Coulombiana. Il problema a molti corpi associato a questa Hamiltoniana non è esattamente risolubile: la teoria del funzionale densità (DFT) si colloca proprio nell'ambito delle teorie volte a risolvere problemi multi-elettronici di questo tipo.

L'idea di base della teoria del funzionale densità è che in un sistema di N fermioni interagenti soggetti ad un potenziale esterno esista una relazione biunivoca tra l'energia del sistema E e la densità a singolo corpo ρ : il punto di partenza della DFT consiste nell'esprimere l'energia di un sistema di fermioni interagenti come funzionale della densità. I due teoremi presentati da Hohenberg e Kohn nel 1964 nell'articolo [13] affermano infatti che l'energia totale di un sistema di fermioni interagenti può essere scritta come un funzionale della densità di particelle, qualsiasi sia il potenziale esterno V_{ext} , e il funzionale $E[\rho]$ presenta un minimo in corrispondenza della densità di stato fondamentale. Al minimo, il funzionale assume esattamente il valore dell'energia di ground state. Ne discende quindi che è possibile esprimere l'energia associata al sistema descritto da (2.1) come funzionale della densità nel seguente modo:

$$E_{V_{ext}}[\rho] = \langle \psi | T + V + V_{ext} | \psi \rangle = F[\rho] + \int d^3r V_{ext}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

La prima uguaglianza è data dalla definizione di energia totale del sistema mentre la seconda definisce il funzionale. Il funzionale definito dalla somma dell'energia cinetica e del potenziale Coulombiano è noto come *funzionale universale di Hohenberg e Kohn*, in quanto non contiene informazioni circa il potenziale esterno e non dipende quindi dallo specifico sistema considerato. Tutta l'informazione relativa al potenziale esterno è contenuta nel secondo funzionale. Il vantaggio principale di questo tipo di approccio, come anticipato, è il fatto che il problema di N elettroni interagenti definito da una

funzione d'onda complessa in $3N$ dimensioni può essere studiato tramite la densità di particelle, cioè una funzione reale in sole tre coordinate. La dimostrazione fornita da Hohenberg e Kohn non è però costruttiva: il teorema garantisce l'esistenza e l'universalità del funzionale F senza però fornire una strategia adeguata per la sua costruzione. Inoltre, non si fornisce alcuno strumento per il calcolo della densità elettronica di stato fondamentale. In questo ambito risulta particolarmente utile lo *schema Kohn-Sham* in cui la densità di particelle ρ viene rappresentata in termini di funzioni d'onda ausiliarie $\phi(\mathbf{r})$ a singola particella (*orbitali*): l'idea di base è quella di mappare il sistema originale in un sistema ausiliario di fermioni non interagenti avente la stessa densità ρ . Indicando con j l'orbitale di singola particella, si ha:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_j |\phi_j(\mathbf{r})|^2 \quad (2.3)$$

In questa ottica, possiamo scrivere l'energia cinetica totale come:

$$T = \langle \psi | T | \psi \rangle = \sum_j \int d^3r \phi_j^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \phi_j(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

e l'energia Coulombiana classica (detta anche *energia di Hartree*) può essere considerata singolarmente come

$$E_{Hartree} = \frac{e^2}{2} \int d^3r d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.5)$$

Il funzionale (3.2) può essere quindi riscritto nel seguente modo:

$$E_{KS} = T + E_{Hartree} + E_{xc} + \int d^3r V_{ext}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

dove E_{xc} è detto termine di *scambio-correlazione*. Questo termine risulta essere un funzionale non analitico e non locale che contiene tutta l'informazione non considerata dagli altri termini del funzionale energia totale. Imponendo la condizione di ortogonalità tra gli orbitali, si differenzia l'equazione precedente rispetto alla densità (appendice A) aggiungendo un moltiplicatore di Lagrange:

$$\frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})} \left(E_{KS} - \epsilon \int d^3r' \phi_j^*(\mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}') \right) = 0 \quad (2.7)$$

La variazione rispetto a ρ diviene in realtà una variazione rispetto a ϕ_j^* , infatti valgono le seguenti uguaglianze:

$$\frac{\delta}{\delta \phi_j^*} = \frac{\delta \rho}{\delta \phi_j^*} \frac{\delta}{\delta \rho} = \phi_j \frac{\delta}{\delta \rho} \quad (2.8)$$

2. Modello teorico

A partire dalle equazioni precedenti, si ricavano quindi le equazioni Kohn-Sham:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{e^2}{2} \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho(\mathbf{r})} + V_{ext}(\mathbf{r}) \right) \phi_j(\mathbf{r}) = \epsilon \phi_j(\mathbf{r}) \quad (2.9)$$

dove ϵ rappresenta l'energia associata all'orbitale ausiliario di singola particella. L'equazione può essere riscritta in forma compatta introducendo il potenziale efficace V_{KS} :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{KS} \right) \phi_j(\mathbf{r}) = \epsilon \phi_j(\mathbf{r}) \quad (2.10)$$

Le equazioni di Kohn-Sham permettono quindi di ridefinire un problema di particelle interagenti eliminando l'interazione tra le stesse e modificando il potenziale a cui queste sono soggette, senza però alterare la densità del sistema (il potenziale efficace dipende in maniera univoca dalla densità del sistema per i teoremi HK). Il più grande limite di questa teoria è dato dalla difficoltà di assegnare al termine di *scambio-correlazione* una forma analitica. Le equazioni KS forniscono un risultato via via più preciso quanto migliore è l'approssimazione per il termine E_{xc} : se l'espressione funzionale del termine di scambio-correlazione fosse nota, si otterrebbe un'energia del sistema esatta. Esistono però molti problemi legati al calcolo della correlazione elettronica, infatti, nonostante vi sia la certezza della sua esistenza, non conosciamo alcuna formula esplicita del funzionale E_{xc} . Risulta quindi necessario confinare lo studio del termine di scambio-correlazione ad approssimazioni locali. Una prima forma associata a questo funzionale nasce nell'ambito della teoria LDA, *Local Density Approximation*, secondo cui l'energia di scambio-correlazione di un sistema interagente viene approssimata con quella di un analogo gas elettronico *omogeneo*. Ad ogni volumetto d^3r con densità elettronica $\rho(\mathbf{r})$ viene attribuita l'energia di scambio e correlazione che avrebbe un gas omogeneo con densità pari a quella locale. In tale ottica, l'energia di scambio-correlazione assume la forma

$$E_{xc} = \int e_{xc}^{hom}[\rho(\mathbf{r})] \rho(\mathbf{r}) d^3r \quad (2.11)$$

Tuttavia questa formulazione fornisce generalmente approssimazioni in eccesso e viene quindi corretta con termini dipendenti dal gradiente della densità o ordini di derivazione più alti.

2.3 Sistemi nucleari

Nel tentativo di estendere la trattazione appena fornita della DFT al caso nucleare, sono necessarie alcune precisazioni. La differenza principale tra sistemi elettronici e sistemi nucleari è data dal fatto che i nuclei sono oggetti auto-legati, per cui, contrariamente ad un sistema di elettroni, il termine di potenziale esterno V_{ext} è nullo. Inoltre, a differenza dell'interazione Coulombiana che si manifesta tra elettroni, la forza forte che interagisce tra i nucleoni risulta essere a breve range, fortemente dipendente dallo spin e caratterizzata da diversi termini (centrale, spin, spin-orbita, tensoriale) mediamente attrattivi (con interazione p-n più forte dell'interazione n-n e p-p) e di uguale intensità. In aggiunta, nei sistemi nucleari si hanno termini di interazione a tre corpi $V(i,j,k)$ non trascurabili. Nonostante il nucleo sia costituito da elementi fortemente interagenti, esso risulta essere un sistema *diluito*, con una densità interna approssimativamente costante di $\rho = 0.16 fm^{-3}$. In media, si può immaginare che un nucleone non risenta della forte componente repulsiva NN a breve range (la distanza tra due nucleoni risulta maggiore del range della forza) bensì si può considerare un'interazione a *campo medio*, in cui cioè ogni nucleone si muove in un potenziale efficace a singola particella che risulta essere una media tra le interazioni con tutte le altre particelle.

A partire dagli anni Settanta, vennero proposte diverse Hamiltoniane efficaci con l'idea di utilizzarle nell'ambito di una teoria di campo medio: l'obiettivo era quello di comprendere se fosse possibile dedurre il campo medio nucleare da una teoria più ampia, dando una formulazione teorica rigorosa dei modelli fino ad allora proposti (si pensi, ad esempio, al potenziale empirico di Woods-Saxon [12]). Tra queste teorie, il metodo Hartree-Fock ha lo scopo di fornire una spiegazione microscopica dell'esistenza di campo medio nucleare.

Per comprendere come utilizzare la teoria del funzionale densità in ambito nucleare, si consideri un'Hamiltoniana analoga a (2.1) relativa però a un sistema di nucleoni interagenti

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N V(i, j) \quad (2.12)$$

dove $V(i,j)$ rappresenta il potenziale di interazione a due corpi con cui si approssima l'interazione tra i nucleoni. È possibile effettuare i calcoli mostrati in questa sezione aggiungendo anche un termine di potenziale a tre corpi. Si definisca poi il seguente funzionale:

$$E_{HF}[\rho] = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (2.13)$$

2. Modello teorico

La teoria Hartree-Fock assume che le funzioni d'onda incognite a N particelle possano essere approssimate con un determinante di Slater, cioè una combinazione lineare totalmente antisimmetrica dei prodotti di autofunzioni a singola particella:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{N!} \sum_P (-)^P \phi_{P_1}(\mathbf{r}_1) \dots \phi_{P_N}(\mathbf{r}_N) \quad (2.14)$$

La procedura HF consiste nel cercare il ground-state del sistema tra le autofunzioni della forma (2.14) tramite la minimizzazione del valore di aspettazione dell'energia. La minimizzazione del funzionale (2.13) è analoga a (2.7): si scriva esplicitamente il funzionale energia come $E_{HF} = T + V_{tot}$ dove

$$T = \langle \psi | T | \psi \rangle = \sum_j \int d^3r \phi_j^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \phi_j(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

$$V_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{jl} \int d^3r d^3r' \phi_j^*(\mathbf{r}) \phi_l^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left(\phi_j(\mathbf{r}) \phi_l(\mathbf{r}') - \phi_j(\mathbf{r}') \phi_l(\mathbf{r}) \right) \quad (2.16)$$

Partendo dalla definizione della densità di particelle del sistema

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

è possibile riscrivere il primo termine del potenziale totale (*termine di Hartree*) come

$$\frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \rho(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') \quad (2.18)$$

di cui è possibile fornire un semplice significato fisico: si tratta dell'energia associata all'overlap della densità di probabilità del sistema pesata sul potenziale di interazione. Il secondo termine (*termine di Fock*), invece, non ha alcun significato classico: si tratta di un contributo non locale che nasce dalla natura fermionica delle particelle considerate.

Una volta definita l'energia totale del sistema, si procede poi con la minimizzazione del funzionale, come mostrato nel paragrafo precedente, tramite un moltiplicatore di Lagrange che garantisce l'ortonormalità delle funzioni d'onda. Si ottiene così un set di equazioni che prende il nome di *equazioni Hartree-Fock*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_j(\mathbf{r}) + \sum_{l=1}^N \int d^3r' \phi_l^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left(\phi_j(\mathbf{r}') \phi_l(\mathbf{r}) - \phi_j(\mathbf{r}) \phi_l(\mathbf{r}') \right) = \epsilon_j \phi_j(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

Si tratta di un sistema di equazioni di Schrödinger agli autovalori di singola particella ϵ_j che viene risolto in maniera iterativa autoconsistente a partire da un set di autofunzioni di prova.

2.3.1 Energia di Hartree-Fock

In questo paragrafo si mostra il procedimento tramite cui individuare una formula compatta per il calcolo dell'energia totale di un sistema di fermioni interagenti in approssimazione Hartree-Fock. Si consideri quindi un sistema di N neutroni: l'energia totale del sistema studiato - che verrà chiamata semplicemente energia Hartree-Fock E_{HF} del sistema - viene calcolata tramite un principio variazionale partendo dal fatto che E_{HF} risulta essere il valore di aspettazione dell'Hamiltoniana H sulla funzione d'onda totale del sistema ψ , data da un determinante di Slater.

$$E_{HF} = \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | T + V | \psi \rangle \quad (2.20)$$

È possibile svolgere esplicitamente il calcolo di (2.20) come mostrato in [12], ottenendo come risultato

$$E_{HF}[\rho] = \sum_{i,j=1}^N t_{ij} \rho_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l=1}^N \rho_{ki} \bar{v}_{ij,kl} \rho_{lj} \quad (2.21)$$

che, nella base di Hartree Fock in cui ρ è diagonale con autovalori 0 e 1, può essere riscritta nel seguente modo

$$E_{HF} = \sum_{i=1}^N t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \bar{v}_{ij,ij} \quad (2.22)$$

dove t_{ii} rappresenta l'energia cinetica di singola particella mentre $\bar{v}_{ij,ij}$ rappresenta l'elemento di matrice antisimmetrizzato¹ relativo al potenziale totale

$$\bar{v}_{ij,ij} = \langle \phi_i \phi_j | V (1 - P_\sigma P_\tau P_{\mathbf{r}}) | \phi_i \phi_j \rangle$$

P_σ, P_τ e $P_{\mathbf{r}}$ sono rispettivamente l'operatore di scambio di spin, isospin e posizione. L'energia cercata è quella di ground state, per cui è necessario minimizzare l'equazione (2.21): tramite una variazione dell'energia rispetto

¹È possibile scrivere questa uguaglianza: $\langle ij | V | ij - ji \rangle = \langle ij | V (1 - P_\sigma P_\tau P_{\mathbf{r}}) | ij \rangle$ in cui, invece di antisimmetrizzare la funzione d'onda, è stato antisimmetrizzato l'elemento di matrice.

alla densità, è possibile riscrivere l'Hamiltoniana HF di singola particella come

$$h_{lk} = \frac{\partial E[\rho]}{\partial \rho_{kl}} = t_{lk} + \sum_{i,j=1}^N \bar{v}_{ij,kl} \rho_{ji} \quad (2.23)$$

e le equazioni di Hartree-Fock diventano il problema agli autovalori dato da

$$h_{kk'} \phi_{k'} = \epsilon_k \delta_{kk'} \phi_{k'} \quad (2.24)$$

Dalle equazioni (2.22) e (2.24) si ricava che (è possibile consultare la dimostrazione completa in [12]) l'energia totale di ground state di un sistema di N neutroni può essere scritta come

$$E_{0HF} = \sum_{i=1}^N \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \bar{v}_{ij,ij} \quad (2.25)$$

cioè non è data semplicemente dalla somma delle energie di singola particella. Questa espressione, nel caso di forze indipendenti dalla densità, risulta essere pari a metà della somma dell'energia cinetica e dell'autovalore di singola particella, come mostrato in [20], del tipo

$$E_{0HF} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(t_i + \epsilon_i \right) \quad (2.26)$$

2.3.2 Interazione efficace di Skyrme

Il principale ostacolo dell'applicazione diretta del metodo Hartree-Fock al caso nucleare è rappresentato dalla componente fortemente repulsiva a breve range dell'interazione nucleone-nucleone nel vuoto: il termine di Hartree diverge per $\mathbf{r} \approx \mathbf{r}'$. Nell'ambito della sola teoria HF, risulta impossibile definire un potenziale efficace di interazione V tra le particelle che descriva in maniera corretta le proprietà nucleari note sperimentalmente (saturazione nucleare, masse, raggi, masse efficaci, ...). Questi problemi vengono risolti utilizzando un'Hamiltoniana dipendente dalla densità: per applicare le equazioni HF al caso nucleare, si individuano infatti parametrizzazioni apposite per i potenziali efficaci V che permettono di generare un funzionale energia dipendente dalla densità

$$E[\rho] = \langle \psi | H[\rho] | \psi \rangle \quad (2.27)$$

Una delle interazioni efficaci *density-dependent* più largamente utilizzata in fisica nucleare è quella di Skyrme.

2. Modello teorico

La parametrizzazione di Skyrme descrive l'interazione tra nucleoni tramite forze di contatto proporzionali a δ di Dirac dipendenti dal momento. L'uso di forze di Skyrme come interazioni efficaci nel calcolo HF ha il grande merito di permettere una descrizione estremamente accurata delle energie di legame e dei raggi nucleari dell'intera tavola periodica. Nel 1956, Skyrme propose un'interazione efficace tra nucleoni costituita da un termine a due corpi e da uno a tre corpi.

$$V = \sum_{i < j} V(i, j) + \sum_{i < j < k} V(i, j, k) \quad (2.28)$$

È possibile verificare (si veda [20]) che il termine a tre corpi può essere riscritto, per nuclei pari-pari, come un'interazione a due corpi dipendente dalla densità (termine col parametro t_3 della formula esplicita). L'interazione di Skyrme completa ha la seguente forma:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & t_0(1 + \chi_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} t_1(1 + \chi_1 P_\sigma) [\mathbf{P}^\dagger{}^2 \delta(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}) \mathbf{P}^2] \\ & + t_2(1 + \chi_2 P_\sigma) \mathbf{P}^\dagger \cdot \delta(\mathbf{r}) \mathbf{P} + \frac{1}{6} t_3(1 + \chi_3 P_\sigma) \rho^\alpha(\mathbf{R}) \delta(\mathbf{r}) \\ & + i W_0(\sigma_1 + \sigma_2) \cdot [\mathbf{P}^\dagger \times \delta(\mathbf{r}) \mathbf{P}] \end{aligned}$$

dove $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$, $\mathbf{P} = \frac{1}{2i}(\nabla_1 - \nabla_2)$ e $P_\sigma = (1 + \sigma_1 \cdot \sigma_2)$ è l'operatore di scambio di spin. I dieci parametri liberi vengono stimati a partire da fit sperimentali relativi alle binding energy e ai raggi di nuclei atomici (esistono diversi set di parametri possibili [14]).

Le motivazioni che hanno portato questa interazione ad essere la più utilizzata negli ultimi anni sono principalmente due: in primo luogo, utilizzando set di parametri ragionevoli, è possibile studiare l'energia di legame e i raggi nucleari degli elementi dell'intera tavola periodica; inoltre, un'interazione a delta permette di semplificare notevolmente la formulazione matematica della teoria utilizzata, riducendo drasticamente la complessità dei calcoli effettuati.

Utilizzando un'interazione di Skyrme tra le particelle, l'energia totale di un sistema di nucleoni interagenti in approssimazione Hartree-Fock descritta da (2.26) deve essere modificata. Dato che il potenziale dipende direttamente dalla densità, nel calcolo (2.23) si ottiene un ulteriore termine E_R , detto *termine di rearrangement*. Questa energia è legata al termine a tre corpi dell'interazione di Skyrme (è il termine dipendente direttamente da ρ).

2. Modello teorico

L'energia totale di un sistema di nucleoni interagenti in approssimazione Hartree-Fock diventa quindi

$$E_{0HF} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (t_i + \epsilon_i) + E_R \quad (2.29)$$

dove l'energia di rearrangement risulta pari a

$$E_R = -\frac{1}{12} \sum_{i,j,k} \langle ijk | \bar{v}_{123} | ijk \rangle$$

La formula (2.29) descrive in maniera compatta l'energia totale di un sistema di nucleoni interagenti in approssimazione Hartree-Fock.

2.4 Equazioni RPA

La teoria DFT può essere applicata anche al caso dipendente dal tempo: la *time-dependent density functional theory* (TDDFT) risulta essere l'estensione al caso dipendente dal tempo della teoria del funzionale densità. L'obiettivo di questa teoria è quello di studiare un sistema di fermioni interagenti soggetti ad un potenziale variabile nel tempo. L'idea di base venne fornita da Runge e Gross nel teorema che oggi porta il loro nome, pubblicato nell'articolo [18] nel 1984. Questo teorema risulta essere analogo al teorema HK nel caso dipendente dal tempo: il teorema RG garantisce l'esistenza di un funzionale energia esatto dipendente dalla densità per un sistema di fermioni interagenti.

Più precisamente, si consideri un sistema descritto dalla seguente Hamiltoniana:

$$H' = H + V_{pert}(t) \quad (2.30)$$

dove $V_{pert}(t)$ rappresenta una perturbazione esterna dipendente dal tempo. Il teorema Runge-Gross permette di relazionare in maniera univoca il potenziale perturbativo con la densità del sistema dipendente dal tempo $\rho(t)$.

Anche per la teoria TDDFT è possibile utilizzare l'approccio KS: si considera un sistema di particelle non interagenti con una densità pari a quella del sistema interagente. La funzione d'onda del sistema non interagente può quindi essere scritta come un determinante di Slater di orbitali a singola particella mentre la densità dipendente dal tempo viene essere espressa in termini degli orbitali KS dipendenti dal tempo:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_j |\phi_j(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.31)$$

2. Modello teorico

dove le funzioni d'onda $\phi_j(\mathbf{r}, t)$ soddisfano le equazioni di Schrödinger dipendenti dal tempo del tipo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_j(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{KS}(\mathbf{r}, t) + V_{pert}(\mathbf{r}, t) \right) \phi_j(\mathbf{r}, t) \quad (2.32)$$

Il potenziale $V_{KS}(\mathbf{r}, t)$ è la somma del potenziale diretto di Hartree, del potenziale esterno e del potenziale di scambio-correlazione.

$$V_{KS}(\mathbf{r}, t) = V_{Hartree}(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + V_{xc}(\mathbf{r}, t) \quad (2.33)$$

Se i primi due termini risultano essere la banale generalizzazione al caso dipendente dal tempo dei potenziali descritti nei paragrafi precedenti, il potenziale di scambio-correlazione necessita di un'attenzione particolare. Questa interazione viene costruita a partire dal concetto di causalità per cui il potenziale ad un tempo t non può risentire delle variazioni della densità ad un tempo t' successivo: il parallelismo descritto precedentemente tra la densità di particelle dipendente dal tempo e il potenziale perturbativo non può prescindere da una condizione iniziale al tempo t_0 . Un esatto funzionale di scambio-correlazione al tempo t deve avere memoria dell'intera storia del sistema per $t' < t$.

Le equazioni Kohn-Sham dipendenti dal tempo possono essere risolte direttamente: l'idea è quella di definire la somma tra il potenziale V_{KS} e l'energia cinetica come un operatore $h(t)$ in modo che l'evoluzione temporale della densità possa essere scritta come

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [h(t), \rho(t)] \quad (2.34)$$

Fissata una condizione iniziale, è possibile costruire un operatore di evoluzione temporale

$$U(t) = e^{\frac{-i\Delta t}{\hbar} \cdot h}$$

tale per cui l'evoluzione della densità del sistema sia data da

$$\rho(t_0 + \Delta t) = U \rho(t_0)$$

Se si considera una perturbazione esterna *piccola* (tale per cui lo sviluppo della funzione d'onda e della densità del sistema possano essere considerate solo fino al primo ordine senza commettere errori significativi), è possibile linearizzare l'equazione (2.34): si parla, in ambito di fisica nucleare, di

2. Modello teorico

Random Phase Approximation (RPA). La teoria RPA risulta essere il limite per piccole ampiezze della teoria DFT dipendente dal tempo. Il grande vantaggio di questa teoria è il fatto che, al primo ordine, la variazione del sistema dipende solo dalla funzione d'onda di ground state stazionaria, per cui è possibile utilizzare tutte le proprietà della DFT.

Si consideri quindi una perturbazione esterna *piccola*, per cui ha senso supporre sia armonica:

$$V_{pert}(\mathbf{r}, t) = V_{pert}(\mathbf{r})e^{i\omega t} + V_{pert}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \quad (2.35)$$

La densità del sistema subirà una variazione con la stessa dipendenza temporale, per cui è possibile scrivere:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}) + \delta\rho(\mathbf{r}, t) \quad (2.36)$$

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = \delta\rho(\mathbf{r})e^{i\omega t} + \delta\rho^*(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \quad (2.37)$$

dove $\rho(\mathbf{r})$ indica la densità stazionaria del ground-state. A livello matematico, considerare una perturbazione esterna *piccola* si traduce richiedendo che la variazione della densità del sistema possa essere espressa linearmente rispetto alla perturbazione. La variazione $\delta\rho$ della densità del sistema assume quindi la forma:

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' dt' \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') V_{pert}(\mathbf{r}', t') \quad (2.38)$$

dove χ rappresenta la funzione risposta del sistema considerato. L'equazione (2.38) rappresenta la variazione della densità del sistema in $(\mathbf{r}, t)$ a causa di una perturbazione in $(\mathbf{r}', t')$: in generale, la variazione del sistema non è legata alla perturbazione al tempo t , bensì al tempo t' precedente a t . L'equazione (2.38) può essere riscritta introducendo la funzione risposta χ_0 del sistema (funzione risposta non interagente), esprimibile in funzione delle autofunzioni di singola particella e delle energie di eccitazione.

Si supponga di riproporre la teoria Hartree-Fock con autofunzioni associate ad una variazione della densità del sistema della forma $e^{\pm i\omega t}$: le funzioni d'onda a singola particella devono necessariamente essere della forma

$$\phi_j(\mathbf{r}, t) = \phi_j(\mathbf{r}) + e^{i\omega t} \delta\phi_j(\mathbf{r}) + e^{-i\omega t} \delta\phi_j^*(\mathbf{r}) \quad (2.39)$$

dove $\delta\phi_j$ e $\delta\phi_j^*$ sono ortogonali a ϕ_j in modo da garantire l'ortonormalità al primo ordine delle funzioni d'onda:

$$\langle \phi_j(\mathbf{r}, t) | \phi_j(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle \phi_j(\mathbf{r}) | \phi_j(\mathbf{r}) \rangle = 1$$

2. Modello teorico

L'hamiltoniana HF dipendente dal tempo in approssimazione lineare risulta essere:

$$H' = H + V_{pert}(\mathbf{r})e^{i\omega t} + V_{pert}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \delta V_{KS}e^{i\omega t} + \delta V_{KS}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \quad (2.40)$$

dove la variazione sul potenziale efficace è definita come

$$\delta V_{KS}(\mathbf{r}) = \int d^3r' \frac{\delta V_{KS}(\mathbf{r})}{\delta \rho(\mathbf{r}')} \delta \rho(\mathbf{r}') \quad (2.41)$$

Inserendo le autofunzioni di singola particella nell'equazione di Schrödinger $i\hbar \partial \phi_j(\mathbf{r}, t) / \partial t = H' \phi_j(\mathbf{r}, t)$ e trascurando termini al secondo ordine, si ottiene che la variazione della densità risulta pari a:

$$\delta \rho(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' dt' \chi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') V_{tot}(\mathbf{r}', t') \quad (2.42)$$

dove si considera la funzione risposta χ_0 , la quale rappresenta l'ampiezza di probabilità di una variazione nella densità del sistema in $(\mathbf{r}, t)$ a causa di una perturbazione in $(\mathbf{r}', t')$. Per funzioni d'onda reali, la funzione risposta χ_0 può essere calcolata analiticamente a partire dalle funzioni d'onda KS e risulta pari a:

$$\chi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{j=1}^N \sum_{m \in \{unocc\}} \phi_j^*(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}') \phi_m^*(\mathbf{r}') \left(\frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_m - \epsilon_j)} - \frac{1}{\hbar\omega + (\epsilon_m - \epsilon_j)} \right) \quad (2.43)$$

Nella notazione utilizzata, il pedice j rappresenta uno stato occupato, mentre il pedice m rappresenta uno stato di buca. Si noti che la funzione risposta χ_0 presenta dei poli che coincidono con le energie di eccitazione $m-j$ del sistema considerato.

Proseguendo nell'analisi della teoria RPA con approccio KS, è possibile individuare le cosiddette *equazioni RPA* inserendo (2.35) e (2.37) nell'equazione di evoluzione temporale definita da (2.34), trascurando gli ordini superiori a quello lineare in $\delta \rho$. Passando al limite di perturbazione esterna tendente a zero, è possibile scrivere l'equazione agli autovalori (basata su una base particella-buca KS):

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B & -A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}$$

2. Modello teorico

dove $\hbar\omega$ sono le energie di eccitazioni di piccola ampiezza RPA mentre X e Y rappresentano gli autovettori che definiscono le ampiezza di probabilità: X indica l'ampiezza di probabilità relativa alla transizione dall'orbitale i all'orbitale m mentre, al contrario, Y indica l'ampiezza di probabilità relativa alla transizione opposta, dall'orbitale m all'orbitale i . Gli elementi di matrice A e B sono definiti come:

$$A_{mi,nj} = \delta_{ij}\delta_{mn}(\epsilon_m - \epsilon_i) + \int d^3r d^3r' \phi_m^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') \frac{\delta h(\mathbf{r})}{\delta \rho(\mathbf{r}')} \phi_i(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}') \quad (2.44)$$

$$B_{mi,nj} = \int d^3r d^3r' \phi_m^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') \frac{\delta h(\mathbf{r})}{\delta \rho(\mathbf{r}')} \phi_i(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}') \quad (2.45)$$

Il termine $\frac{\delta h(\mathbf{r})}{\delta \rho(\mathbf{r}')}$ presente nelle espressioni di A e B rappresenta il fatto che una variazione nella densità del sistema comporta una variazione nell'operatore efficace di singola particella h . Alla base di una teoria di approssimazione lineare della TDDFT vi è l'idea che una variazione nella densità del sistema induce una variazione nel potenziale efficace che, a sua volta, determina una variazione della densità stessa. In tal modo si vengono a creare oscillazioni armoniche attorno al ground-state, governate da una forza residua definita esattamente come

$$V_{res}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\delta h(\mathbf{r})}{\delta \rho(\mathbf{r}')} \quad (2.46)$$

Nel prossimo capitolo verrà presentato il teorema del potenziale armonico. L'obiettivo della prossima sezione è quello di mostrare come il teorema del potenziale armonico giochi un ruolo fondamentale nei fenomeni dipendenti dal tempo di un sistema a molti corpi e nelle relative teorie *time-dependent*, come la teoria RPA. La grande importanza di questo teorema è il fatto che rappresenta uno dei pochi risultati esatti nell'ambito delle proprietà dinamiche di un sistema di particelle interagenti.

Capitolo 3

Teorema del potenziale armonico

3.1 Teorema HPT

Il teorema del potenziale armonico riveste un ruolo fondamentale nei fenomeni dipendenti dal tempo: tramite questo teorema, è possibile fornire una descrizione analitica esatta dell'evoluzione temporale della funzione d'onda di un sistema di fermioni interagenti in un potenziale armonico sotto l'azione di un campo esterno omogeneo nello spazio e dipendente dal tempo. In questa sezione, se ne riporta la dimostrazione completa perché risulta particolarmente utile al fine di comprendere il senso fisico del teorema stesso.

Il teorema HPT è una generalizzazione del *teorema di Kohn* [1] e della sua evoluzione nel *teorema di Brey* [2]. I due teoremi citati studiano sistemi di elettroni interagenti tramite un potenziale a due corpi $U = \sum_{i,j} u(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ soggetti ad una perturbazione esterna omogenea nello spazio e dipendente dal tempo. Generalizzando questi due teoremi, si giunge al teorema HPT: esso studia un sistema di fermioni interagenti tramite un potenziale a due corpi dipendente unicamente dalla differenza delle coordinate spaziali delle particelle confinate in un potenziale armonico. Si considera poi una perturbazione esterna omogenea nello spazio e dipendente dal tempo che agisce sul sistema. L'Hamiltoniana associata al sistema descritto è

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = H_0 - \mathbf{F}(t) \cdot \sum_j \mathbf{r}_j \quad (3.1)$$

3. Teorema del potenziale armonico

con

$$H_0 = \sum_{j=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_j} \right)^2 + \frac{1}{2} \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j \right] + \sum_{j>i}^N \left[V_c(\{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\}) + V_s(\{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\}) \sigma_i \sigma_j \right] \quad (3.2)$$

in cui V_c rappresenta un potenziale a due corpi dipendente unicamente dalla differenza delle coordinate spaziali tra le particelle, V_s indica un potenziale di interazione di spin e $\mathbf{F}(t) \cdot \sum_j \mathbf{r}_j$ rappresenta la perturbazione esterna dipendente unicamente dal tempo. La matrice $\mathbf{K}$ che definisce la buca armonica viene considerata diagonale e positiva, del tipo

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \omega_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_z^2 \end{pmatrix}$$

Sia ψ_0 l'autofunzione a più particelle dell'Hamiltoniana H_0 , tale per cui vale la relazione

$$H_0(\{\mathbf{r}_j\})\psi_0(\{\mathbf{r}_j\}) = E_0\psi_0(\{\mathbf{r}_j\}) \quad (3.3)$$

Si applichi ora una traslazione $\mathbf{x}(t)$ indipendente dalla posizione a tutte le coordinate di ψ_0 e si consideri il seguente stato:

$$\psi_{HPT}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \exp\left(-\frac{iE_0 t}{\hbar} - iNS(t) + \frac{iNm}{\hbar} \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \mathbf{R}\right) \psi_0(\bar{\mathbf{r}}_1, \bar{\mathbf{r}}_2, \dots, \bar{\mathbf{r}}_N) \quad (3.4)$$

dove $\bar{\mathbf{r}}_j$ indica l'operatore posizione relativo all'origine del sistema in moto e $\mathbf{R}$ indica la posizione del centro di massa:

$$\bar{\mathbf{r}}_j = \mathbf{r}_j - \mathbf{x}(t) \quad (3.5)$$

$$\mathbf{R} = \frac{\sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j}{N} \quad (3.6)$$

mentre $S(t)$ è dato da:

$$S(t) = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t \left[\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2(t') - \frac{1}{2} \mathbf{x}(t') \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{x}(t') \right] dt' \quad (3.7)$$

Dove non espressamente indicato, ψ_0 rappresenta la funzione d'onda rispetto alle coordinate non traslate $\mathbf{r}_j$.

Si definisca ora un operatore unitario

$$T(\mathbf{x}) = \exp\left[-\frac{i\mathbf{x}(t) \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j}{\hbar} \right]$$

3. Teorema del potenziale armonico

tale per cui

$$T(\mathbf{x})\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi_0(\bar{\mathbf{r}}_1, \bar{\mathbf{r}}_2, \dots, \bar{\mathbf{r}}_N) \quad (3.8)$$

Sia quindi

$$\mathbf{P} = \frac{\sum_{j=1}^N \mathbf{P}_j}{N}$$

l'operatore di momento totale: possiamo riscrivere la funzione d'onda ψ_{HPT} data in (3.4) come:

$$\psi_{HPT}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = e^{\left(-\frac{iE_0 t}{\hbar} - iNS(t) + \frac{iNm}{\hbar} \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \mathbf{R}\right)} e^{-\frac{iN\mathbf{x}(t)\mathbf{P}}{\hbar}} \psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (3.9)$$

Derivando l'equazione precedente rispetto al tempo si ottiene

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{HPT}}{\partial t} = \left[E_0 + N \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 - \frac{1}{2} \mathbf{x}(t) \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{x}(t) \right) - Nm \ddot{\mathbf{x}} \mathbf{R} \right] \psi_{HPT} + N \exp(\dots) \dot{\mathbf{x}} \mathbf{P} \psi_0 \quad (3.10)$$

Per valutare $H(t)\psi_{HPT}(t) = (H_0 - N\mathbf{F}(t)\mathbf{R})\psi_{HPT}$, si definiscano i seguenti operatori:

$$A(t) = \frac{iNm\dot{\mathbf{x}}\mathbf{R}}{\hbar} \quad (3.11)$$

$$B(t) = -\frac{iNm\mathbf{x}\mathbf{P}}{\hbar} \quad (3.12)$$

$$C(t) = -i \left(\frac{E_0 t}{\hbar} + NS(t) \right) \quad (3.13)$$

Considerando che gli operatori A e C commutano tra loro, valgono le seguenti proprietà:

$$\psi_{HPT} = H_0 \cdot e^C e^A e^B \psi_0 = E_0 \psi_{HPT} + e^C \left[H_0, e^A e^B \right] \psi_0 \quad (3.14)$$

$$\left[H_0, e^A e^B \right] = \left[H_0, e^A \right] e^B + e^A \left[H_0, e^B \right] \quad (3.15)$$

$$\left[H_0, e^A \right] = \left(H_0 - e^A H_0 e^{-A} \right) e^A \quad (3.16)$$

dove vale la relazione:

$$e^A H_0 e^{-A} = H_0 + \left[A, H_0 \right] + \frac{1}{2!} \left[A, \left[A, H_0 \right] \right] + \dots \quad (3.17)$$

3. Teorema del potenziale armonico

Si calcolino quindi i seguenti commutatori:

$$\left[A, H_0 \right] = \left[\frac{iNm\dot{\mathbf{x}}\mathbf{R}}{\hbar}, H_0 \right] = -N\dot{\mathbf{x}}\mathbf{P} \quad (3.18)$$

$$\left[B, H_0 \right] = \left[\frac{-iN\mathbf{x}\mathbf{P}}{\hbar}, H_0 \right] = -N\mathbf{x}\mathbf{K}\mathbf{R} \quad (3.19)$$

$$\left[A, [A, H_0] \right] = \left[\frac{iNm\dot{\mathbf{x}}\mathbf{R}}{\hbar}, -N\dot{\mathbf{x}}\mathbf{P} \right] = Nm\dot{\mathbf{x}}^2 \quad (3.20)$$

$$\left[B, [B, H_0] \right] = \left[-\frac{iN\mathbf{x}\mathbf{P}}{\hbar}, -N\mathbf{x}\mathbf{K}\mathbf{R} \right] = N\mathbf{x}\mathbf{K}\mathbf{x} \quad (3.21)$$

Tutti i commutatori di ordine superiore si annullano. Partendo dall'equazione (3.16), è possibile scrivere:

$$\begin{aligned} \left[H_0, e^A \right] &= \left(H_0 - H_0 - \left[A, H_0 \right] - \frac{1}{2!} \left[A, [A, H_0] \right] \right) e^A = \\ &= \left(N\dot{\mathbf{x}}\mathbf{P} - \frac{1}{2} Nm\dot{\mathbf{x}}^2 \right) e^A \\ \left[H_0, e^B \right] &= \left(H_0 - H_0 - \left[B, H_0 \right] - \frac{1}{2!} \left[B, [B, H_0] \right] \right) e^B = \\ &= \left(N\mathbf{x}\mathbf{K}\mathbf{R} - \frac{1}{2} N\mathbf{x}\mathbf{K}\mathbf{x} \right) e^B \end{aligned}$$

Riscrivendo l'equazione (3.14) a partire dai commutatori calcolati, si ottiene

$$\begin{aligned} \psi_{HPT} &= E_0 \psi_{HPT} + e^C \left\{ \left[H_0, e^A \right] e^B + e^A \left[H_0, e^B \right] \right\} \psi_0 = \\ &= E_0 \psi_{HPT} + e^C \left(N\dot{\mathbf{x}}\mathbf{P} - \frac{1}{2} Nm\dot{\mathbf{x}}^2 \right) e^A e^B \psi_0 + \\ &+ e^C e^A \left(N\mathbf{x}\mathbf{K}\mathbf{R} - \frac{1}{2} N\mathbf{x}\mathbf{K}\mathbf{x} \right) e^B \psi_0 \end{aligned}$$

Si definisca ora un operatore $G = N\dot{\mathbf{x}}\mathbf{P}$. Riutilizzando le formule relative ai commutatori indicate precedentemente, valgono le seguenti relazioni:

$$\left[A, G \right] = \left[\frac{iNm\dot{\mathbf{x}}\mathbf{R}}{\hbar}, N\dot{\mathbf{x}}\mathbf{P} \right] = -Nm\dot{\mathbf{x}}^2 \quad (3.22)$$

$$\left[G, e^A \right] = Nm\dot{\mathbf{x}}^2 e^A \quad (3.23)$$

3. Teorema del potenziale armonico

Sostituendo nell'equazione precedente si ottiene:

$$H_0\psi_{HPT} = E_0\psi_{HPT} + e^C e^A N \dot{\mathbf{x}} \mathbf{P} \psi_0(\{\bar{\mathbf{r}}_j\}) + N \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 + \mathbf{x} \mathbf{K} \mathbf{R} - \frac{1}{2} \mathbf{x} \mathbf{K} \mathbf{x} \right) \psi_{HPT} \quad (3.24)$$

Sottraendo ora l'equazione (3.10) da (3.24), si ottiene:

$$\left(H(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi_{HPT} = \left[m \ddot{\mathbf{x}} + \mathbf{K} \mathbf{x} - \mathbf{F}(t) \right] \left(\sum_j \mathbf{r}_j \right) \psi_{HPT} \quad (3.25)$$

Si mostra quindi che la funzione d'onda ψ_{HPT} soddisfa l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo se e solo se $\mathbf{x}(t)$ soddisfa l'equazione classica di oscillatore armonico.

$$m \ddot{\mathbf{x}} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{F}(t) \quad (3.26)$$

Questo risultato prende il nome di *teorema del potenziale armonico*: la funzione d'onda ψ_{HPT} che descrive il sistema studiato soggetto ad una perturbazione esterna dipendente dal tempo è pari alla soluzione ψ_0 dell'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo (3.3) traslata rigidamente di $\mathbf{x}(t)$ e moltiplicata per il fattore di fase definito in (3.7). Come conseguenza, se è nota la soluzione dell'equazione stazionaria, l'evoluzione temporale del sistema è anch'essa nota.

La funzione d'onda ψ_{HPT} descritta in (3.4) differisce da quella stazionaria ψ_0 solo per un fattore di fase e una traslazione delle coordinate. Le densità di probabilità associate a queste funzioni d'onda soddisfano quindi l'equazione

$$|\psi_{HPT}(\{\mathbf{r}_j\}, t)|^2 = |\psi_0(\{\mathbf{r}_j - \mathbf{x}(t)\})|^2 \quad (3.27)$$

dove $|\psi_0(\{\mathbf{r}_j - \mathbf{x}(t)\})|^2$ rappresenta la densità di probabilità del sistema stazionario rigidamente traslata di $\mathbf{x}(t)$. Dato che l'operatore densità a singolo corpo ρ è definito come il modulo quadro della funzione d'onda del sistema $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$, l'equazione precedente può essere riscritta come

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0(\mathbf{r} - \mathbf{x}(t)) \quad (3.28)$$

La densità a singolo corpo del sistema traslato al tempo t risulta pari alla densità dello stato stazionario ρ_0 traslata rigidamente di $\mathbf{x}(t)$.

Il centro di massa del sistema è legato al sistema accelerato $\bar{\mathbf{r}}$ da un moto di oscillatore armonico forzato: per passare dal sistema accelerato a quello di quiete è sufficiente moltiplicare per il fattore di fase descritto da (3.7). Si noti inoltre che questo teorema vale anche nella condizione limite di oscillatore armonico libero, in cui la forzante esterna risulta nulla $\mathbf{F}(t)=0$.

3.2 Teorema HPT applicato alla teoria TDLDA

L'importanza del teorema del potenziale armonico nasce dal fatto che rappresenta uno dei pochi risultati esatti nell'ambito delle proprietà dinamiche di un sistema a molti corpi di particelle interagenti. È possibile mostrare analiticamente che la teoria TDLDA soddisfa esattamente il teorema HPT. Si consideri infatti l'equazione relativa al caso dipendente dal tempo della teoria KS (nella sezione teorica è l'equazione (2.32)):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_j(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{KS}(\mathbf{r}, t) + V_{pert}(\mathbf{r}, t) \right) \phi_j(\mathbf{r}, t) \quad (3.29)$$

dove il potenziale V_{KS} è dato dalla somma del potenziale diretto $V_{Hartree}$, il potenziale esterno V_{ext} e il potenziale di scambio-correlazione V_{xc} . Nel caso statico, la teoria TDLDA si riduce alla teoria della densità locale Kohn-Sham: $\phi_j(\mathbf{r}, t)$ risulta essere pari a $\exp(-i\omega_j t) \phi_j(\mathbf{r})$, dove ϕ_j e $\hbar\omega_j$ sono le autofunzioni e gli autovalori Kohn-Sham.

Si consideri il ground state dell'Hamiltoniana H_0 non soggetta alla perturbazione esterna definito dalle funzioni d'onda KS $\phi_j^0(\mathbf{r})$ con autovalori $\hbar\omega_j^0$. L'Hamiltoniana HPT completa è caratterizzata da un potenziale esterno $V_{ext}(\mathbf{r}) = (1/2)\mathbf{r} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}$ e da una perturbazione $V_{pert}(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{F}(t) \cdot \mathbf{r}$. Il teorema HPT implica che il ground state a molti corpi dell'Hamiltoniana completa ψ_{HPT} nel sistema accelerato sia il ground state corrispondente alle funzioni d'onda Kohn-Sham $\phi_j^0(\bar{\mathbf{r}})$ rigidamente traslate ($\bar{\mathbf{r}} = \mathbf{r} - \mathbf{x}$). Per tornare al sistema di riferimento di quiete, si moltiplica per il fattore di fase che definisce la traslazione, ottenendo l'autofunzione TDLDA:

$$\phi_j(\mathbf{r}, t) = \exp\left[-i\omega_j t - iS(t) + \frac{im}{\hbar} \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \mathbf{r}\right] \phi_j^0(\mathbf{r} - \mathbf{x}(t)) \quad (3.30)$$

con S data da (3.7). Operando sull'autofunzione (3.30) come mostrato nella dimostrazione del teorema HPT, si mostra algebricamente che soddisfa (3.29) solo se la traslazione $\mathbf{x}(t)$ risolve il moto di oscillatore armonico forzato

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{F}(t) \quad (3.31)$$

In questo modo, si ha un'esatta soluzione TDLDA per il moto HPT.

In questo elaborato si vuole mostrare che la versione linearizzata della teoria TDLDA (teoria RPA) soddisfa il teorema HPT: passando al limite di perturbazione esterna tendente a zero, è possibile linearizzare la soluzione ottenuta ponendosi in approssimazione RPA. In questo caso, il moto del centro di massa sarà un moto di oscillatore libero (la forzante è nulla) descritto

3. Teorema del potenziale armonico

quindi dall'equazione

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{x} \quad (3.32)$$

Il teorema del potenziale armonico impone inoltre che la densità del sistema $\rho(\mathbf{r}, t)$ sia la densità di ground state rigidamente traslata, cioè deve soddisfare l'equazione $\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0(\mathbf{r} - \mathbf{x}(t))$. Si deduce quindi che l'equazione (2.42) per un sistema armonicamente confinato soggetto ad una perturbazione esterna definita come $V_{ext} = -\mathbf{F}(t) \cdot \mathbf{r}$ viene soddisfatta per una variazione della densità data da:

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{x}(t) \cdot \nabla\rho_0(\mathbf{r}) \quad (3.33)$$

dove $\mathbf{x}(t)$ è il moto classico che obbedisce a (3.31).

Capitolo 4

Teorema HPT applicato al caso nucleare

4.1 Obiettivo

Nel capitolo precedente è stata fornita una descrizione approfondita del teorema del potenziale armonico, mostrando a livello analitico i vincoli che impone sulla teoria LDA dipendente dal tempo. L'obiettivo di questa sezione è quello di mostrare a livello computazionale che anche la versione linearizzata di questa teoria, cioè la *teoria RPA*, soddisfa il teorema HPT.

L'intero studio è stato condotto utilizzando il programma *skyrme_rpa* [16] che permette di risolvere le equazioni HF e RPA per un sistema di neutroni e/o protoni interagenti sotto l'ipotesi di simmetria sferica. Il programma utilizzato è strutturato in due sezioni strettamente connesse tra loro. La prima parte permette di risolvere l'iterazione Hartree-Fock per un nucleo (A, Z) utilizzando un'interazione di Skyrme a scelta, ottenendo in maniera auto-consistente il campo medio HF e le densità di particelle. La seconda parte, invece, permette di risolvere le equazioni RPA fissata una base particella-buca, ottenendo così le energie di risonanza e le densità di transizione del sistema in presenza di una perturbazione esterna.

Il sistema analizzato in questo elaborato è costituito da neutroni interagenti confinati in una buca armonica, le *neutron drops*. Si tratta di sistemi fittizi (non sono sistemi legati) che risultano di fondamentale importanza per lo studio di nuclei esotici e delle stelle di neutroni. Dato che in questi sistemi è presente solo un'interazione neutrone-neutrone, le equazioni che descrivono la dinamica del sistema risultano più semplici rispetto ad un sistema

nucleare completo: le neutron drops rappresentano un semplice modello per investigare sistemi ricchi di neutroni [22, 23].

Lo schema seguito nell'elaborazione di questo studio è il seguente:

- Implementazione del codice: il programma *skyrmrpa* è stato modificato secondo le esigenze richieste dal problema analizzato. In primo luogo, è stato inserito un potenziale armonico della forma $V_{ext} = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ nell'equazione di Schrödinger radiale. Il potenziale utilizzato è isotropo, in modo da non alterare la simmetria sferica utilizzata nel programma. A verifica della correttezza del codice, è stato studiato un sistema di N neutroni non interagenti tra loro, in modo da ricondursi ad un problema risolubile analiticamente: l'oscillatore armonico isotropo in tre dimensioni. I risultati ottenuti circa le energie di singola particella, le energie totali del sistema e i raggi quadratici medi sono stati quindi confrontati con le previsioni teoriche.
- Studio delle neutron drops: è stato studiato un sistema di N neutroni confinati al variare della buca armonica di confinamento. In letteratura esistono diversi articoli che presentano importanti risultati circa le neutron drops. In particolare, in questo elaborato è stato fatto un confronto con i risultati proposti negli articoli [9] e [10] relativi alle energie totali del sistema, energie di singola particella e raggi quadratici medi. In questa sezione, si presenta inoltre un confronto con un sistema di neutroni in approssimazione Thomas Fermi.
- Verifica dei vincoli HPT nella teoria RPA: in questa sezione è stato verificato a livello computazionale che la teoria RPA soddisfa esattamente il teorema del potenziale armonico. Una volta individuate tutte le possibili configurazioni particella-buca al di sotto di una energia di cut-off E_c e ottenuto quindi un set di autovalori e autovettori per gli stati vibrazionali ν di un sistema di particelle interagenti, è stato calcolato su queste configurazioni il valor medio di un operatore isoscalare di dipolo, cioè generatore delle traslazioni del sistema nello spazio. È stato verificato che il programma individuasse un'energia di moto del centro di massa pari a quella di oscillatore armonico semplice, come indicato dall'equazione (3.31). Per verificare che si trattasse effettivamente di un moto armonico, è stata studiata la densità di transizione associata a questo moto in funzione del gradiente della densità di ground state: applicando la trasformata di Fourier a (3.33), si garantisce che la traslazione $\mathbf{x}(t)$ è un moto armonico solo se la densità di transizione e

il gradiente della densità di ground state differiscono tra loro per una costante moltiplicativa.

4.2 Implementazione del codice

La prima operazione effettuata è stata l'inserimento di un potenziale a buca armonica nell'equazione di Schrödinger radiale nella procedura iterativa HF. Per verificare la bontà del programma, si è pensato di studiare un problema la cui soluzione è nota in forma analitica: l'oscillatore armonico isotropo tridimensionale. Ponendosi nel caso di simmetria sferica, l'equazione studiata è:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{2} m r^2 \omega^2 \right] u(r) = E_{n,l} u(r) \quad (4.1)$$

dove $u(r)$ rappresenta la funzione d'onda radiale ridotta (è stata usata la notazione di [24]). Le energie $E_{n,l}$ di singola particella sono legate ai numeri quantici n e l della stessa dalla relazione:

$$E_{n,l} = \hbar\omega \left(2(n-1) + l + \frac{3}{2} \right) \quad (4.2)$$

Lo studio dell'energia totale del sistema è stato effettuato in tre modi differenti ma tra loro equivalenti. Il primo metodo è dato semplicemente dalla somma degli autovalori di singola particella: per un sistema di neutroni non interagenti confinati in una buca armonica deve valere la seguente equazione:

$$E_{tot} = \sum_i \epsilon_i \quad (4.3)$$

dove ϵ_i rappresenta l'autovalore di singola particella.

Il secondo metodo utilizzato è direttamente legato alla teoria Hartree-Fock, per cui è stata utilizzata la formula (2.26):

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(t_i + \epsilon_i \right)$$

dove l'energia totale viene calcolata come la metà della somma delle energie cinetiche e degli autovalori di singola particella. La modifica apportata al codice con l'inserimento di un potenziale armonico della forma $\frac{1}{2} m \omega^2 r^2$ ha portato ad una modifica della formula sopra citata: essendo la buca armonica un potenziale a singola particella come il potenziale V utilizzato nella

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

dimostrazione di (2.26), è stato sufficiente aggiungere un termine relativo all'energia associata alla buca armonica della forma

$$u_i = \int V_{HO} \rho d^3 r.$$

La formula complessiva utilizzata per il calcolo dell'energia totale del sistema risulta quindi

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(t_i + \epsilon_i + u_i \right) \quad (4.4)$$

L'energia di ground state di un sistema di N neutroni viene cioè calcolata come la metà della somma dell'energia cinetica di singola particella, autovalore energetico di singola particella e energia associata alla buca di confinamento, sommato su tutte le particelle considerate. Nel prossimo paragrafo verrà aggiunta un'interazione di Skyrme tra le particelle. Dato che questa interazione dipende direttamente dalla densità, la formula completa utilizzata nel calcolo dell'energia totale è

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(t_i + \epsilon_i + u_i \right) + E_R \quad (4.5)$$

dove è stato introdotto il termine di rearrangement.

L'ultimo metodo utilizzato per il calcolo dell'energia totale è dato dall'integrale della densità di energia del sistema

$$E_{tot} = \int h dr^3 \quad (4.6)$$

dove h è la somma delle densità di energia cinetica e di energia associata al campo armonico esterno. Nelle prossime sezioni verranno studiati sistemi di particelle interagenti dove la forma generale della densità di energia risulta più complessa. In questo contesto, la densità di energia h è data dalla somma dei termini di energia cinetica, interazione di Skyrme tra le particelle, energia di rearrangement, interazione di spin-orbita e energia associata al potenziale armonico esterno.

Per quanto riguarda lo studio dei raggi quadratici medi, dato un sistema di particelle non interagenti confinate in una buca armonica, è possibile calcolare analiticamente il valore di aspettazione di r^2 sugli autostati di oscillatore armonico. Si può ricavare che

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} (N + 3/2) \quad (4.7)$$

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

dove N è un numero intero definito a partire dai numeri quantici di singola particella ($N = 2(n - 1) + l$).

Si riportano di seguito i risultati ottenuti circa le energie di singola particella, energie totali e raggi quadratici medi al quadrato di un sistema di venti neutroni confinati in una buca armonica con parametro $\hbar\omega$ pari a 3MeV, 5MeV e 10MeV. La tabella 4.1 mostra le energie di singola particella, confrontandole con i valori attesi. A lato vengono indicati anche i numeri quantici di singola particella, a verifica delle degenerazioni energetiche dei livelli individuati. La tabella 4.2 riporta i risultati relativi alle energie totali dei sistemi studiati, calcolate come somma degli autovalori di singola particella, col metodo HF descritto da (4.4) e come integrale della densità di energia. Da ultimo, la tabella 4.3 riporta i raggi quadratici medi al quadrato degli stessi sistemi analizzati in precedenza, confrontando i valori ottenuti con le previsioni teoriche.

Livello		3 MeV		5 MeV		10MeV	
n	l	$E_{teorica}$	$E_{comput.}$	$E_{teorica}$	$E_{comput.}$	$E_{teorica}$	$E_{comput.}$
1	0	4.5	4.4999	7.5	7.4999	15	14.999
1	1	7.5	7.4999	12.5	12.499	25	24.999
1	2	10.5	10.499	17.5	17.499	35	34.999
2	0	10.5	10.499	17.5	17.499	35	34.999
1	3	13.5	13.499	22.5	22.499	45	44.999
2	2	13.5	13.499	22.5	22.499	45	44.999

Tabella 4.1: Test del potenziale HO: è stato inserito nel programma un potenziale armonico della forma $\frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ con valori di $\hbar\omega$ pari a 3MeV, 5MeV e 10MeV. In tabella sono riportati sia i valori ricavati a livello computazionale sia quelli teorici per le energie di singola particella espressi in MeV.

	3MeV	5MeV	10MeV
$E_{tot-autovalori}$ (MeV)	180.0383	299.9814	599.981
$E_{tot-formula}$ (MeV)	180.03373	299.9885	599.97636
$E_{tot-integral}$ (MeV)	180.03801	299.9886	599.97632

Tabella 4.2: Energia totale di un sistema di venti neutroni in una buca armonica da 3MeV, 5MeV e 10MeV calcolata come somma degli autovalori di singola particella, come indicato dalla formula (4.4) e come integrale della densità di energia

I risultati ottenuti sono perfettamente coerenti con le previsioni teoriche. Le energie di singola particella e i relativi raggi quadratici medi sono in ottimo accordo con i valori attesi. Anche le degenerazioni dei livelli energetici

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

	3 MeV		5 MeV		10MeV	
n/l	$\langle r^2 \rangle$	$\langle r^2 \rangle_{teo.}$	$\langle r^2 \rangle$	$\langle r^2 \rangle_{teo.}$	$\langle r^2 \rangle$	$\langle r^2 \rangle_{teo.}$
$1s_{\frac{1}{2}}$	20.73512	20.73553	12.44183	12.44132	6.22043	6.22066
$1p_{\frac{3}{2}}$	34.55449	34.55922	20.73463	20.73553	10.36723	10.36776
$1p_{\frac{1}{2}}$	34.55449	34.55922	20.73463	20.73553	10.36723	10.36776
$1d_{\frac{5}{2}}$	48.38283	48.38290	29.02961	29.02974	14.51432	14.51487
$2s_{\frac{1}{2}}$	48.38283	48.38290	29.02961	29.02974	14.51432	14.51487
$1d_{\frac{3}{2}}$	48.38283	48.38290	29.02961	29.02974	14.51432	14.51487

Tabella 4.3: Raggi quadratici medi al quadrato per un sistema di venti neutroni in una buca armonica da 3MeV, 5MeV e 10MeV. I valori indicati sono espressi in fm^2 .

sono corrette. I tre metodi utilizzati per il calcolo delle energie totali del sistema forniscono risultati compatibili tra loro, garantendo, come previsto teoricamente, un'equivalenza tra i metodi stessi.

4.3 Studio delle neutron drops

La seconda fase di questo elaborato consiste in uno studio delle neutron drops, confrontando le proprietà ricavate a livello computazionale con gli articoli [9] e [10]. L'interazione tra le particelle utilizzata è SKP [25], la quale si distingue per avere massa efficace pari a uno. Il funzionale energia associato a questa interazione è privo di termini proporzionali a J^2 . I parametri che caratterizzano l'interazione sono definiti in tabella 4.4. Nel confronto

t_0	-293.7	$MeV \cdot fm^3$
t_1	320.62	$MeV \cdot fm^5$
t_2	-337.41	$MeV \cdot fm^5$
t_3	18709.0	$MeV \cdot fm^6$
χ_0	0.29215	
χ_1	0.65318	
χ_2	-0.53732	
χ_3	0.18103	
W_0	100.00	$MeV \cdot fm^5$
W'_0	100.00	$MeV \cdot fm^5$
α	0.16666666	

Tabella 4.4: Parametri dell'interazione SKP.

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

con i dati proposti da S. Gandolfi nell'articolo [10], è stata utilizzata anche l'interazione SLy4 [26], caratterizzata dai parametri in tabella 4.5.

t_0	-2488.91	$MeV \cdot fm^3$
t_1	486.82	$MeV \cdot fm^5$
t_2	-546.39	$MeV \cdot fm^5$
t_3	13777.0	$MeV \cdot fm^6$
χ_0	0.834	
χ_1	-0.344	
χ_2	-1.0	
χ_3	1.354	
W_0	123.00	$MeV \cdot fm^5$
W'_0	123.00	$MeV \cdot fm^5$
α	0.16666666	

Tabella 4.5: Parametri dell'interazione SLy4.

In tabella 4.6 sono indicati le energie totali e i raggi quadratici medi ottenuti per un sistema di N neutroni interagenti tramite interazione SKP confinati in una buca armonica di ampiezza $\hbar\omega$.

N	$\hbar\omega(\text{MeV})$	$E_{Tot}(\text{MeV})$	$\sqrt{\langle r^2 \rangle}(\text{fm})$
2	3	7.438799	4.0276
	5	12.128894	3.1257
	8	19.31989	2.5176
	10	24.283647	2.2853
	12	29.394939	2.1169
8	3	42.470040	4.7806
	5	68.875681	3.7072
	8	109.29938	2.9826
	10	137.12544	2.7033
20	3	137.09002	5.4241
	5	222.21445	4.2112
	8	352.34399	3.3777
28	3	219.81913	5.7778
	5	353.37080	4.4265
	8	549.21463	3.4450

Tabella 4.6: Risultati relativi a un sistema di N neutroni interagenti tramite interazione SKP in una buca di HO di ampiezza $\hbar\omega$.

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

I risultati sono coerenti con le previsioni: a fissato numero di particelle, all'aumentare del parametro $\hbar\omega$ associato alla buca, aumenta l'energia totale del sistema mentre il raggio quadratico medio diminuisce.

Lo studio dell'energia totale e dei raggi quadratici medi di un sistema di N neutroni è stato portato a termine seguendo lo schema proposto nell'articolo [10]: le energie totali sono state confrontate con quelle che si ricaverebbero in approssimazione di Thomas Fermi mentre i raggi quadratici medi sono stati ricavati sia per l'interazione SKP che per l'interazione SLy4 in due buche differenti (10MeV e 5MeV).

Per quanto riguarda l'energia totale del sistema, ponendosi in approssimazione di Thomas-Fermi (si veda l'appendice B) in cui, in ogni punto dello spazio, le particelle risentono del potenziale come se fosse localmente pari a una costante, è possibile calcolare analiticamente la densità di stati $g(\epsilon)$: l'energia totale di un sistema di N fermioni non interagenti in una trappola di potenziale armonico è data da

$$E_{Fermi} = \frac{3^{4/3}}{4} \hbar\omega N^{4/3} \approx \hbar\omega N^{4/3} \quad (4.8)$$

e risulta essere quindi proporzionale all'energia associata alla buca armonica e a una potenza del numero di particelle considerate. In tabella 4.7 si riportano le energie totali del sistema ricavate con interazione SKP e calcolate come $\hbar\omega N^{4/3}$, al variare del numero N di particelle considerate. La buca armonica è fissata a 10MeV.

N	E_{SKP}(MeV)	E_{TF} (MeV)	E_{SKP}/E_{TF}
4	63.635794	63.496042	1.002201
6	98.167165	109.027236	0.900391
8	137.125440	160.000000	0.857034
10	188.886480	215.443469	0.876733
12	237.5999730	274.731418	0.864843
14	283.327190	337.419917	0.839687

Tabella 4.7: Confronto tra le energie di un sistema di N neutroni interagenti tra loro con interazione SKP e un analogo sistema di particelle non interagenti in una buca di HO con energia 10MeV.

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

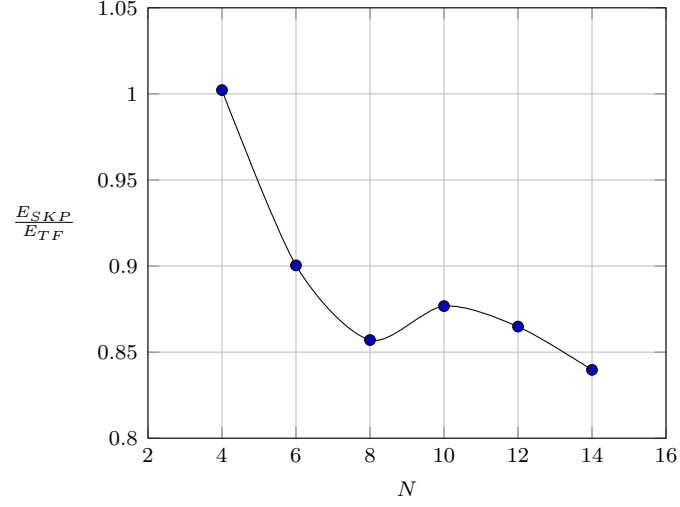


Grafico 1: Rapporto tra l'energia totale con interazione SKP e energia totale senza interazione di un sistema di N particelle in una buca armonica da 10MeV.

Si riportano di seguito i raggi quadratici medi relativi a un sistema di N neutroni in una buca da 5MeV e 10MeV interagenti tra loro tramite un'interazione SKP e SLy4.

$\hbar\omega$ (MeV)	N	$\sqrt{\langle r^2 \rangle}_{SKP}$ (fm)	$\sqrt{\langle r^2 \rangle}_{SLy4}$ (fm)
10	8	2.7033	2.6266
	10	2.7803	2.7402
	12	2.8027	2.7906
	14	2.7885	2.8067
5	8	3.7072	3.6436
	10	3.8997	3.8449
	12	3.9976	3.9305
	14	4.0467	3.9486

Tabella 4.8: Raggi quadratici medi di un sistema di N neutroni interagenti in un potenziale HO da $\hbar\omega=5\text{MeV}$ e $\hbar\omega=10\text{MeV}$ con interazioni SKP e SLy4.

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

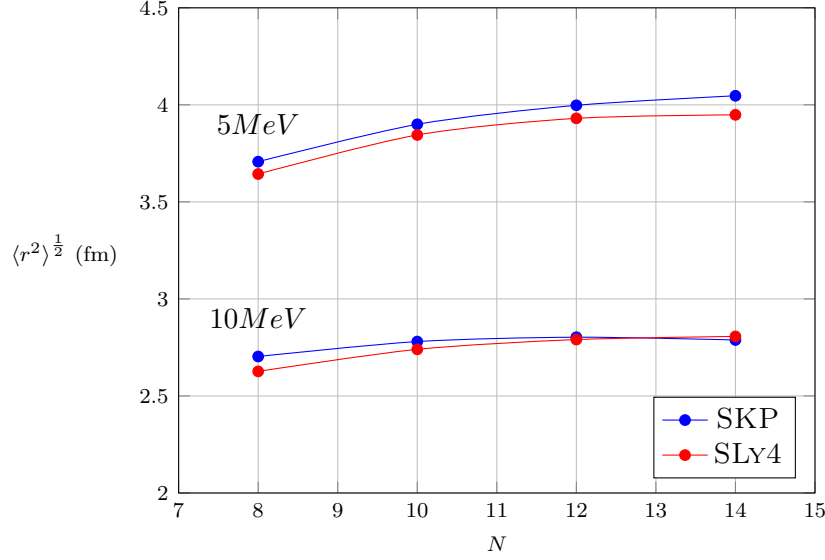


Grafico 2: Confronto tra i raggi quadratici medi di un sistema di N neutroni interagenti tramite SKP o SLy4.

I risultati ottenuti sono in perfetto accordo con quelli proposti da S. Gandolfi in [10].

Si riportano in tabella 4.9 le energie di singola particella di un sistema di N neutroni in una buca armonica da 10 MeV, da confrontare con i valori proposti in [9]. Si noti però che le interazioni utilizzate in questo elaborato differiscono notevolmente dalle interazioni realistiche NN ¹ utilizzata nell'articolo proposto. Questo spiega le disparità a livello numerico ma il corretto andamento dei valori individuati.

¹Si tratta di interazioni tra nucleoni nel vuoto consistenti con esperimenti di scattering nucleone-nucleone. Generalmente, sistemi a poche particelle vengono studiati tramite metodi variazionali o metodi Monte Carlo. Questi metodi sono esatti nel caso di sistemi a poche particelle ma impraticabili per lo studio della maggior parte dei nuclei analizzati in laboratorio. Per contro, le interazioni di Skyrme utilizzate nell'elaborato sono interazioni efficaci tra nucleoni nel mezzo nucleare, utilizzate per descrivere anche sistemi pesanti, e si basano su metodi a molti corpi più semplici, come il metodo Hartree-Fock.

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

N	Livello	E_i (MeV)
4	$1s_{\frac{1}{2}}$	7.1788
	$1p_{\frac{3}{2}}$	18.413
6	$1s_{\frac{1}{2}}$	4.6128
	$1p_{\frac{3}{2}}$	16.162
8	$1s_{\frac{1}{2}}$	5.1364
	$1p_{\frac{3}{2}}$	15.640
	$1p_{\frac{1}{2}}$	18.986
10	$1s_{\frac{1}{2}}$	3.3336
	$1p_{\frac{3}{2}}$	14.083
	$1p_{\frac{1}{2}}$	17.750
	$1d_{\frac{5}{2}}$	25.107
12	$1s_{\frac{1}{2}}$	1.5667
	$1p_{\frac{3}{2}}$	12.602
	$1p_{\frac{1}{2}}$	16.738
	$1d_{\frac{5}{2}}$	23.612
14	$1s_{\frac{1}{2}}$	-0.2103
	$1p_{\frac{3}{2}}$	11.128
	$1p_{\frac{1}{2}}$	16.037
	$1d_{\frac{5}{2}}$	22.105

Tabella 4.9: Energie di singola particella di un sistema del numero di neutroni N interagenti tramite SKP in una buca armonica con $\hbar\omega=10\text{MeV}$.

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

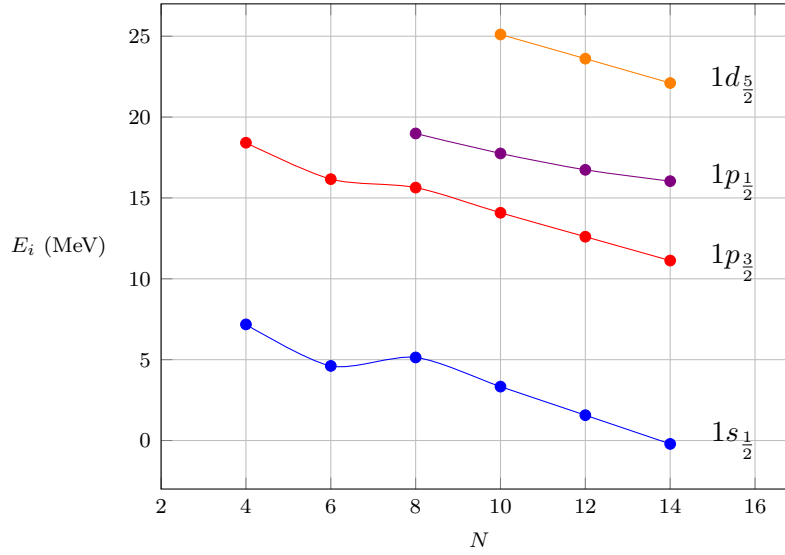


Grafico 3: Energie di singola particella al variare del numero di neutroni N in una buca armonica con $\hbar\omega=10\text{MeV}$.

In generale, si verifica che l'energia di singola particella diminuisce all'aumentare del numero di particelle considerate: si tratta di una conseguenza dell'aumento della forza attrattiva del campo medio tra le particelle.

Per concludere, si riporta uno studio relativo alla densità di diverse neutron drops: il grafico 4 rappresenta la densità di ground state di un sistema di N particelle in una buca armonica da 10MeV .

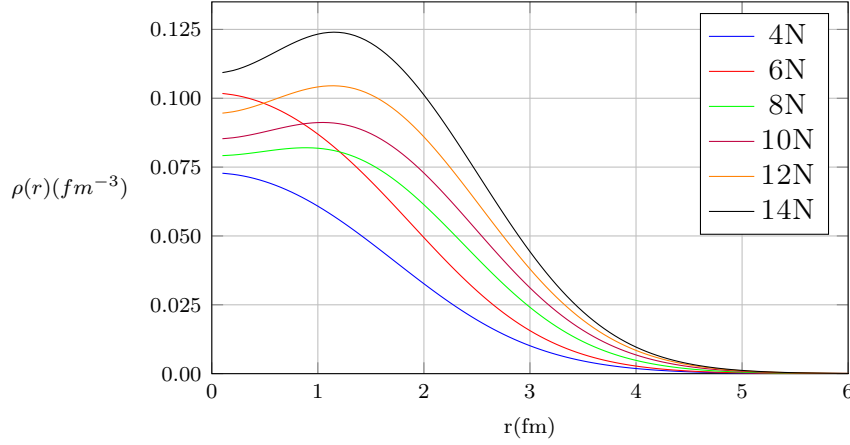


Grafico 4: Densità di ground state di un sistema di N neutroni interagenti in una buca armonica con $\hbar\omega=10\text{MeV}$ in funzione della posizione r .

4.4 Verifica dei vincoli HPT nella teoria RPA

L'obiettivo di questo paragrafo è quello di dare una conferma a livello computazionale del fatto che la teoria RPA verifichi esattamente il teorema HPT. Lo studio si divide in due sezioni: nella prima parte si analizzano le energie di eccitazione degli stati RPA confrontandole con le previsioni teoriche, mentre, nella seconda, se ne analizzano le densità di transizione, verificando che il vincolo (3.33) sia rispettato.

4.4.1 Energie di eccitazione RPA

Il programma `skyrme_rpa`, partendo dall'output del codice HF, è in grado di ottenere informazioni relative agli stati vibrazionali ν del sistema considerato. Dato un valore di J^π , infatti, il codice costruisce una base di configurazioni particella-buca, considerando tutti i possibili stati occupati i e tutti i possibili stati non occupati m che giacciono al di sotto di un'energia di cut-off E_c . La matrice ottenuta rappresentando l'Hamiltoniana H su questa base viene quindi diagonalizzata, ottenendo il set completo di autovettori e autovalori degli stati vibrazionali ν . Gli stati vibrazionali vengono poi eccitati con un campo esterno rappresentato da un operatore $\hat{F}$. Il caso analizzato in questo elaborato è quello di dipolo 1^- , in cui l'operatore

isoscaltare implementato è

$$\hat{F}_{1,0}^{(ISdipolo)} = \sum_{i=1}^N r_i Y_{10}(r_i) \quad (4.9)$$

proporzionale alla componente z della posizione. Questo operatore induce una traslazione del sistema nello spazio [27]. L'obiettivo è quello di verificare che la frequenza del moto del centro di massa sia esattamente quella richiesta da teorema HPT, cioè la frequenza di oscillatore armonico libero, come descritto da (3.32).

Il programma è in grado di ricavare non solo le energie di eccitazione, ma anche altri parametri notevoli relativi alla transizione considerata, tra cui la *reduced transition probability*, o semplicemente *probabilità di transizione ridotta*. Si definisce probabilità di transizione ridotta la seguente grandezza:

$$B(EJ, i \rightarrow f) = \frac{1}{2J_i + 1} |\langle f | \hat{F} | i \rangle|^2 \quad (4.10)$$

dove $|i\rangle$ e $|f\rangle$ rappresentano rispettivamente lo stato iniziale e lo stato finale della transizione. Indicando lo stato finale con $|\nu\rangle$, il codice utilizzato calcola i momenti m_k definiti come

$$m_k = \sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0)^k |\langle \nu | \hat{F} | 0 \rangle|^2 \quad (4.11)$$

Tra questi valori, il momento lineare m_1 (EWSR, *energy weighted sum rule*) è di particolare interesse, perché, per il teorema di Thouless [12], il suo valore risulta pari a metà del valore di aspettazione del doppio commutatore $[\hat{F}, [H, \hat{F}]]$. La energy weighted sum rule può essere scritta nella seguente forma:

$$m_1^{IS} = \sum_{\nu} (E_{\nu} - E_0) |\langle \nu | \hat{F} | 0 \rangle|^2 = \frac{1}{2} \langle 0 | [\hat{F}, [H, \hat{F}]] | 0 \rangle \quad (4.12)$$

Questa relazione è valida per un sistema esatto di di autostati $|\nu\rangle$ dell'Hamiltoniana H . Il codice utilizzato individua però stati $|\nu\rangle$ ed energie E_{ν} approssimati: la EWSR è quindi una verifica della validità dell'approssimazione utilizzata. Infatti, dato un operatore isoscaltare di singola particella della forma

$$\hat{F}_J^{IS} = \sum_{i=1}^N f_J(r_i) Y_{JM}(r_i) \quad (4.13)$$

l'unico termine dell'Hamiltoniana da considerare nel calcolo del doppio commutatore precedentemente descritto è la parte cinetica ². Si ricava quindi che

$$m_1^{IS} = \frac{1}{2} \langle 0 | [\hat{F}, [H, \hat{F}]] | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} N \langle 0 | (\nabla f_J Y_{JM})^2 | 0 \rangle \quad (4.14)$$

Nel caso specifico analizzato in cui l'operatore $\hat{F}$ è della forma indicata nell'equazione (4.9), è possibile riscrivere l'equazione (4.14) nel seguente modo:

$$m_1^{IS} = 9 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{N}{4\pi} \quad (4.15)$$

Si riportano in tabella 4.10 le energie degli stati RPA con le relative probabilità di transizione ridotte; la percentuale riportata indica la probabilità relativa. Il programma utilizzato permette di scegliere da input il valore del salto energetico massimo che definisce l'eccitazione: più questo valore è alto, più la base particella-buca diventa grande (teoricamente, per trovare la soluzione esatta RPA è necessaria una base infinita di stati), ottenendo risultati sempre più precisi. Si è trovato un buon compromesso tra dispendio computazionale e precisione nei risultati fissando l'energia massima di particella a 200MeV.

Le energie di eccitazione degli stati RPA sono in perfetta consistenza con le previsioni teoriche. L'energia RPA trovata è quella di oscillatore armonico libero: essa rappresenta il moto del centro di massa del sistema. Si noti inoltre che gli stati individuati sono praticamente unici: tutta la *forza* legata alla transizione si esaurisce nel moto individuato, come mostrato dalla percentuale di transizione. Per verificare la correttezza dell'approssimazione effettuata nel calcolo RPA, è stato poi verificato che il valore di EWSR individuato fosse compatibile con quello atteso rappresentato dall'equazione (4.15).

²La stessa equazione risulta valida anche nel caso di interazioni di Skyrme per via del carattere a δ dei termini proporzionali al momento.

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

N	$\hbar\omega$ (MeV)	E_{RPA} (MeV)	B(E,1) (fm^2)	%
2	3	3.0000	9.8997	100.000
	5	4.9998	5.9401	100.000
	8	7.9996	3.7125	100.000
	10	9.9995	2.9700	100.000
	12	11.999	2.4750	100.000
8	3	3.0003	39.595	100.000
	5	4.9999	23.760	100.000
	8	8.0002	14.894	100.000
	10	10.002	11.877	100.000
20	3	3.0010	98.956	100.000
	5	4.9998	59.401	100.000
	8	8.0023	37.113	100.000
28	3	3.0019	138.486	99.998
	5	4.9998	83.161	100.000
	8	8.0033	51.951	99.997

Tabella 4.10: Energie degli stati RPA, forze di transizione ridotta e percentuali di transizione al variare del numero di neutroni N e dell'ampiezza della buca $\hbar\omega$.

N	m_1^{IS} (MeV $\cdot fm^2$)	$\hbar\omega$ (MeV)	EWSR (MeV $\cdot fm^2$)
2	29.7014	3	29.6991
	29.7014	5	29.6993
	29.7014	8	29.6985
	29.7014	10	29.6985
	29.7014	12	29.6975
8	118.8058	3	118.7968
	118.8058	5	118.7976
	118.8058	8	118.7949
	118.8058	10	118.7937
20	297.0146	3	296.9669
	297.0146	5	296.9931
	297.0146	8	296.9893
28	415.8204	3	415.7031
	415.8204	5	415.7883
	415.8204	8	415.7794

Tabella 4.11: Confronto del valore atteso del momento lineare calcolato come in equazione (4.15) e ricavato a livello computazionale come prodotto della forza di transizione pesata sul salto energetico.

La tabella 4.11 mostra un'ottima compatibilità tra i valori teorici e i dati ricavati a livello computazionale. Si noti che lo stato individuato risulta praticamente unico.

4.4.2 Densità di transizione

Un'importante grandezza che definisce la relazione tra il ground state di un sistema e tutti i suoi stati eccitati è la densità di transizione. La densità di transizione è la variazione della densità del sistema causata da una perturbazione esterna. Questa grandezza è legata alla probabilità che un nucleone contribuisca ad un modo vibrazionale in funzione della sua posizione $\mathbf{r}$: formalmente, rappresenta l'ampiezza di probabilità che una variazione della densità di singolo corpo in $\mathbf{r}$ induca un modo vibrazionale. A partire dalle ampiezze di transizione $X^{(\nu)}$ e $Y^{(\nu)}$ di un generico stato RPA $|\nu\rangle$, è possibile ricavare la parte radiale $\delta\rho_\nu(r)$ della sua densità di transizione, la quale è definita come

$$\delta\rho_\nu(\mathbf{r}) = \langle\nu|\rho(\mathbf{r})|0\rangle = \delta\rho_\nu(r)Y_{JM}^*(r) \quad (4.16)$$

I numeri quantici J e M sono fissati dall'operatore scelto per perturbare il sistema: le condizioni di lavoro di questo elaborato sono definite da $J^\pi = 1^-$ e M=0. In simmetria sferica, infatti, il momento angolare totale J è un buon numero quantico. Supponendo che lo spin non intervenga in queste eccitazioni (S=0), il momento totale J coincide con il momento angolare L. L'operatore di dipolo utilizzato (descritto da (4.9)) ha un momento angolare L=1. Da qui si ricava una condizione di momento-parità $J^\pi = 1^-$.

In termini delle ampiezze RPA, la densità di transizione radiale può essere espressa nella forma

$$\delta\rho_\nu(r) = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \sum_{mi} \left(X_{mi}^\nu + Y_{mi}^\nu \right) \langle m|Y_J|i\rangle \frac{u_m(r)u_i(r)}{r^2} \quad (4.17)$$

La dimostrazione completa può essere consultata in [21].

L'obiettivo di questo paragrafo è verificare che il vincolo imposto dal teorema HPT sul moto del centro di massa del sistema sia soddisfatto dalla teoria RPA. Questo vincolo mette in relazione la densità di transizione del moto studiato con il gradiente della densità di ground state, secondo l'equazione

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{x}(t) \cdot \nabla\rho_0(\mathbf{r}) \quad (4.18)$$

discussa nella sezione teorica. Per verificare che il moto del centro di massa sia effettivamente un moto armonico, si studia la trasformata di Fourier dell'equazione precedente. Se la traslazione $\mathbf{x}(t)$ risolve il moto di oscillatore ar-

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

monico forzato (3.31) in cui la forzante è definita da potenziale perturbativo della forma (2.35), allora $\mathbf{x}(t)$ deve poter essere scritta come

$$\mathbf{x}(t) = A e^{i\omega t} + A^* e^{-i\omega t} \quad (4.19)$$

dove A rappresenta l'ampiezza di oscillazione. Si ricorda che in approssimazione RPA la densità di transizione ha lo stesso andamento temporale del potenziale perturbativo, per cui può essere scritta anch'essa come una funzione armonica:

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = \delta\rho(\mathbf{r}) e^{i\omega t} + \delta\rho^*(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \quad (4.20)$$

Applicando la trasformata di Fourier all'equazione (4.18), si elimina la dipendenza temporale delle funzioni descritte, ottenendo l'equazione

$$\delta\rho(\mathbf{r}) = -A \cdot \nabla\rho_0(\mathbf{r}) \quad (4.21)$$

Si vuole quindi verificare che la densità di transizione (dipendente da $\mathbf{r}$) si differenzi dal gradiente della densità di ground state solo per una costante moltiplicativa rappresentata dall'ampiezza di oscillazione classica A . Questa costante può essere ricavata imponendo che l'energia associata al moto studiato sia pari all'energia elastica del sistema, secondo:

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2 \quad (4.22)$$

L'energia del moto è quella di oscillatore libero descritta nel paragrafo precedente, pari a $\hbar\omega$ che definisce la buca di potenziale.

Si riportano in tabella 4.12 i valori calcolati per le ampiezze di oscillazione in una buca armonica da 5MeV al variare del numero N di particelle considerate. I grafici rappresentano la densità di transizione e il gradiente della densità di ground state moltiplicata per l'ampiezza A individuata. Secondo le previsioni teoriche, le due funzioni devono coincidere.

N	A(fm)
2	2.879967
8	1.439983
16	1.018222
20	0.910726
28	0.769704

Tabella 4.12: Ampiezze di oscillatore armonico per una buca da 5MeV al variare del numero N di particelle.

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

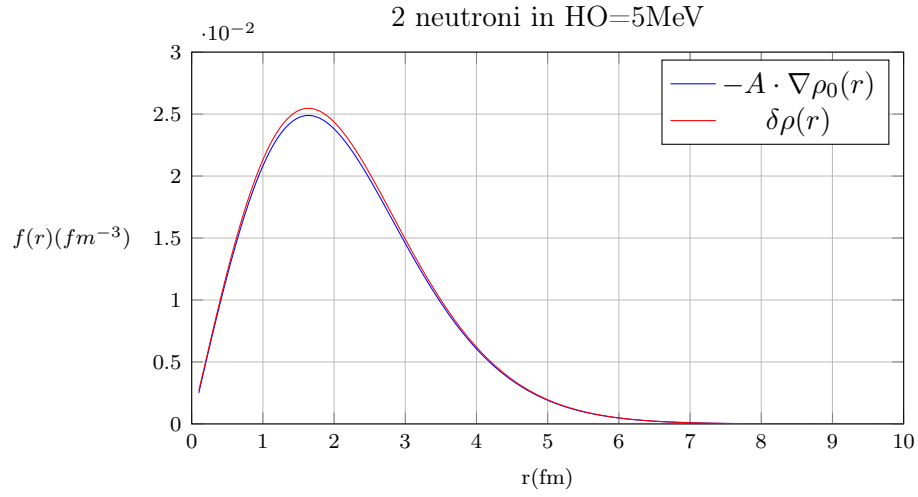


Grafico 5: Relazione tra la densità di transizione e il gradiente della densità di ground state moltiplicata per l'ampiezza di oscillazione del moto per un sistema di due neutroni in una buca da 5MeV.

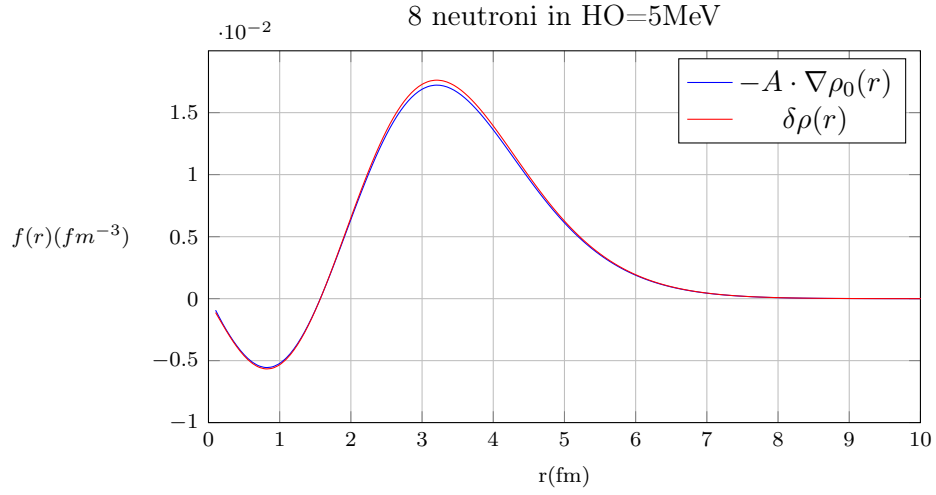


Grafico 6: Relazione tra la densità di transizione e il gradiente della densità di ground state moltiplicata per l'ampiezza di oscillazione del moto per un sistema di otto neutroni in una buca da 5MeV.

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

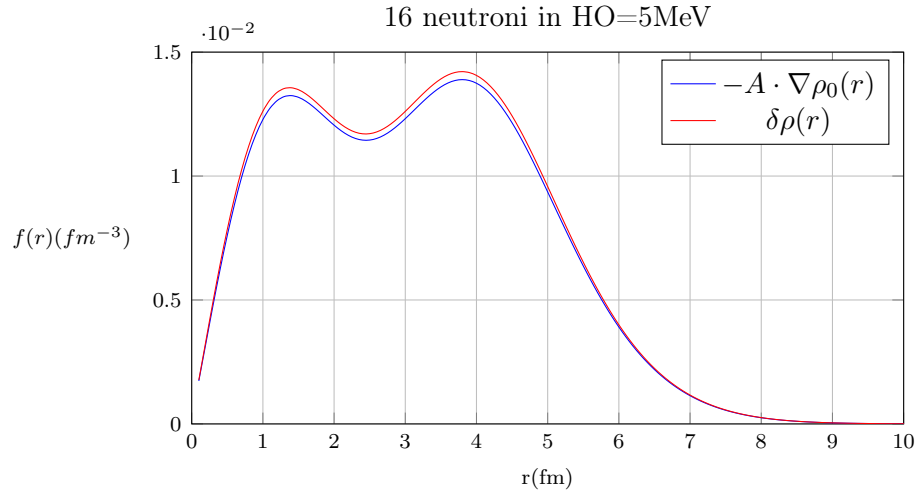


Grafico 7: Relazione tra la densità di transizione e il gradiente della densità di ground state moltiplicata per l'ampiezza di oscillazione del moto per un sistema di sedici neutroni in una buca da 5MeV.

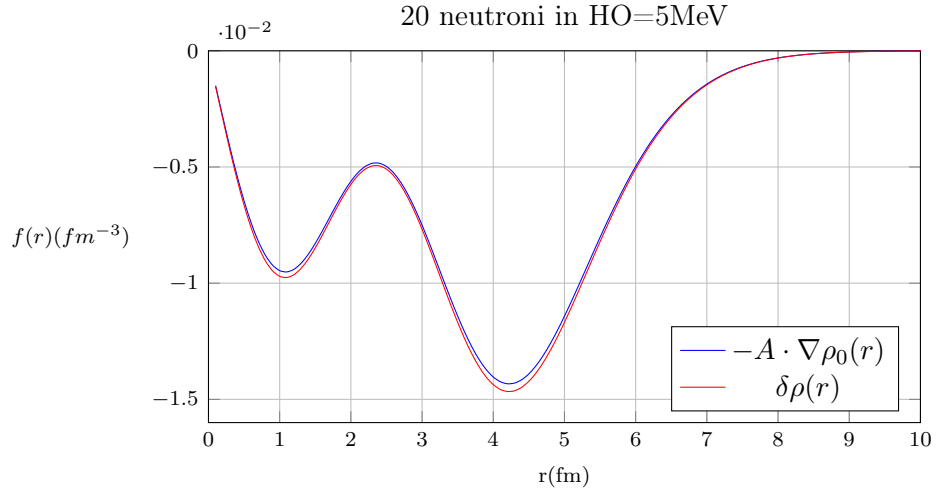


Grafico 8: Relazione tra la densità di transizione e il gradiente della densità di ground state moltiplicata per l'ampiezza di oscillazione del moto per un sistema di venti neutroni in una buca da 5MeV.

4. Teorema HPT applicato al caso nucleare

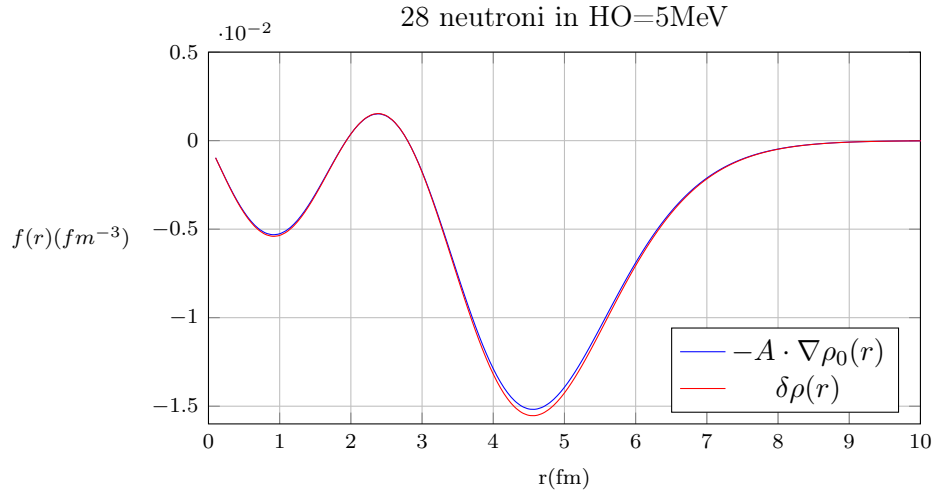


Grafico 9: Relazione tra la densità di transizione e il gradiente della densità di ground state moltiplicata per l'ampiezza di oscillazione del moto per un sistema di ventotto neutroni in una buca da 5MeV.

Si osserva che le due funzioni riportate nei grafici precedenti si sovrappongono con un'ottima compatibilità: in questo modo, si garantisce che il moto del centro di massa è un'oscillazione armonica la cui ampiezza è quella di moto classico. Si mostra così che il moto RPA rispetta i vincoli imposti dal teorema HPT.

Capitolo 5

Conclusioni

Il teorema del potenziale armonico descrive in maniera analitica l'evoluzione temporale di un sistema di fermioni interagenti, confinati in una buca armonica e soggetti ad una perturbazione esterna omogenea nello spazio e variabile nel tempo. In letteratura, questo teorema era stato analizzato solo per sistemi elettronici: in questo elaborato, si è pensato di studiare il teorema HPT nell'ambito di sistemi di neutroni confinati in una buca armonica, le neutron drops. Il punto di partenza di questo studio è quello di verificare analiticamente che il teorema HPT vale anche per sistemi di neutroni interagenti, fornendo poi una descrizione dei vincoli imposti dal teorema sulla teoria di approssimazione della densità locale dipendente dal tempo TDLDA. La parte centrale dell'elaborato mostra a livello computazionale che la versione linearizzata della teoria TDLDA, cioè la teoria Random Phase Approximation, soddisfa esattamente il teorema HPT.

Nella prima parte di questo studio, è stato verificato che il teorema del potenziale armonico può essere utilizzato anche nella descrizione di sistemi di nucleoni della stessa specie. I vincoli imposti dal teorema sulla dinamica del sistema sono due: il moto del centro di massa deve essere un moto di oscillatore armonico forzato descritto da (3.26)

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{F}(t)$$

dove la forzante è legata alla perturbazione esterna e $\mathbf{x}$ definisce la traslazione del sistema; inoltre, la densità di singola particella deve godere della proprietà traslazionale descritta da (3.28)

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0(\mathbf{r} - \mathbf{x}(t))$$

È stato quindi mostrato che la teoria di approssimazione della densità locale dipendente dal tempo soddisfa esattamente il teorema HPT.

5. Conclusioni

Prima di procedere con una verifica a livello computazionale dei vincoli imposti dal teorema nell'ambito della teoria RPA, sono stati studiati sistemi di neutroni interagenti al variare della buca armonica di confinamento e del numero di particelle considerate. Lo schema seguito in questa analisi è quello proposto negli articoli [9] e [10]: sono stati studiati le energie totali del sistema, le energie di singola particella, i raggi quadratici medi e le densità. I risultati ottenuti sono in perfetta corrispondenza con quelli proposti negli articoli citati.

L'ultima sezione di questo elaborato rappresenta la parte principale di questa analisi: si tratta dello studio dei vincoli imposti dal teorema HPT sulla teoria RPA. Nel caso limite di perturbazione esterna tendente a zero, il moto armonico forzato del centro di massa diviene un moto armonico libero, caratterizzato da un'energia pari al parametro $\hbar\omega$ che definisce la buca armonica di confinamento. Inoltre, il vincolo imposto sulla densità di particelle si traduce nel richiedere che la densità di transizione associata al moto sia pari al gradiente della densità di ground state moltiplicata per la traslazione $\mathbf{x}(t)$, secondo l'equazione (3.33)

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{x}(t) \cdot \nabla\rho_0(\mathbf{r})$$

Per verificare che entrambe le condizioni descritte sono soddisfatte dalla teoria RPA, è stato utilizzato il programma *skyrme_rpa* [16] che permette di risolvere in simmetria sferica le equazioni HF-RPA per un sistema di nucleoni soggetti ad interazioni di tipo Skyrme. Sono stati quindi studiati sistemi di neutroni interagenti confinati in una buca armonica e perturbati da un operatore di dipolo generatore delle traslazioni del sistema nello spazio. In primo luogo, è stato verificato che il programma individuasse un'energia di moto del centro di massa pari al parametro $\hbar\omega$ associato alla buca armonica di confinamento. L'energia trovata è in ottimo accordo con le previsioni teoriche. Il moto risulta praticamente unico perché lo stato con energia $\hbar\omega$ esaurisce tutta la probabilità di transizione ridotta. Si è poi proceduto ad una verifica della seconda condizione imposta dal teorema del potenziale armonico: se il moto del centro di massa è un moto armonico di ampiezza A , allora, applicando la trasformata di Fourier al vincolo sulla densità (3.33), deve valere la relazione (4.21)

$$\delta\rho(\mathbf{r}) = -A \cdot \nabla\rho_0(\mathbf{r})$$

cioè la densità di transizione radiale risulta pari al gradiente della densità di ground state moltiplicata per l'ampiezza di oscillazione classica. L'ampiezza A è facilmente ricavabile a partire dall'energia del moto: è stato quindi

5. Conclusioni

possibile rappresentare graficamente la densità di transizione radiale e il gradiente della densità di ground state moltiplicata per l'ampiezza A . I grafici ottenuti si sovrappongono con un'ottima compatibilità. Si garantisce così che la teoria RPA soddisfa esattamente il teorema del potenziale armonico.

Un possibile sviluppo successivo di questa analisi potrebbe essere lo studio del teorema del potenziale armonico applicato a sistemi costituiti da un numero arbitrario di protoni e neutroni confinati: questo studio può essere condotto in maniera analoga all'analisi presentata in questo elaborato. Un'altra interessante prospettiva è lo studio dei vincoli HPT imposti su una teoria RPA deformata, in cui il potenziale di oscillatore armonico non è isotropo.

Appendice A

Derivata funzionale

Un funzionale è un operatore che associa a funzioni in una o più variabili un numero. Formalmente, dato uno spazio B di funzioni *lisce* $u=u(\mathbf{x})$ su $\Omega \subseteq R^n$ dotate di buone condizioni al contorno, definiamo un funzionale F come l'operatore che associa ad ogni $u \in B$ un numero, reale o complesso. Nel calcolo delle variazioni, un funzionale viene generalmente espresso come integrale di una funzione, del tipo

$$F[u(\mathbf{x})] = \int d\mathbf{x} U(\mathbf{x}) \quad (\text{A.1})$$

Nello studio delle equazioni Hartree-Fock presentato nel capitolo relativo al modello teorico studiato in questo elaborato, si richiede l'uso della derivata funzionale, cioè la variazione del funzionale $F[u(\mathbf{x})]$ al variare della funzione $u(\mathbf{x})$. La derivata funzionale rappresenta un'estensione del concetto di derivata parziale di una funzione F in n variabili al caso $F[u(\mathbf{x})]$: si consideri l'usuale derivata parziale

$$\frac{\partial F}{\partial u_i} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F(u_1, u_2, \dots, u_i + \epsilon, \dots, u_n)}{\epsilon}$$

È possibile generalizzare questo concetto di derivata al caso in cui l'indice discreto i diventa una variabile continua x e il set $\{u_i\}$ una funzione $u(x)$ nel seguente modo:

$$\frac{\delta F[u(x)]}{\delta u(y)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[u(x) + \epsilon \delta(x - y)] - F[u(x)]}{\epsilon} \quad (\text{A.2})$$

L'equazione (A.2) rappresenta la derivata funzionale di $F[u(\mathbf{x})]$ rispetto a $u(\mathbf{x})$.

Appendice B

Approssimazione di Thomas-Fermi

La teoria di Thomas-Fermi è la trattazione semiclassica della fisica nucleare in approssimazione di Hartree-Fock di particelle indipendenti. Thomas e Fermi introdussero un metodo variazionale di approssimazione volto a definire l'energia totale di un sistema di particelle non interagenti come funzionale della densità. L'energia di ground state e la densità sono ottenute tramite minimizzazione. Il funzionale Thomas-Fermi è basato sull'energia totale di un gas di Fermi ideale. Il caso studiato in questo elaborato è quello di fermioni confinati in un potenziale armonico esterno. È possibile ricavare a livello analitico [12] la densità di stati di un sistema di questo tipo in approssimazione TF:

$$g_{\text{HO}}(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^3} \quad (\text{B.1})$$

L'energia totale del sistema risulta pari a:

$$E_{\text{Tot}} = \int_0^{\epsilon_F} g_{\text{HO}}(\epsilon) \epsilon d\epsilon = \frac{\epsilon_F^4}{4 \cdot (\hbar\omega)^3} \quad (\text{B.2})$$

mentre il numero totale di particelle è dato da:

$$N = \int_0^{\epsilon_F} g_{\text{HO}}(\epsilon) d\epsilon = \frac{\epsilon_F^3}{3 \cdot (\hbar\omega)^3} \quad (\text{B.3})$$

Nelle equazioni presentate, E_F rappresenta l'energia di Fermi. Ponendo a sistema le equazioni (B.2) e (B.3), si ottiene che l'energia totale di un sistema

B. Approssimazione di Thomas-Fermi

di fermioni in una buca armonica in approssimazione TF è pari a:

$$E_{Tot} = \frac{3^{\frac{4}{3}}}{4} \hbar \omega N^{\frac{4}{3}} \quad (\text{B.4})$$

L'energia totale di un sistema di fermioni non interagenti in una buca armonica risulta quindi proporzionale all'energia di oscillatore libero $\hbar\omega$ e ad una potenza del numero di particelle considerate.

Bibliografia

- [1] Walter Kohn, *Cyclotron Resonance and de Haas-van Alphen Oscillations of an Interacting Electron Gas*.
Physical Review Letters, **123** (1961), 4.
- [2] Brey et al., *Optical and magneto optical absorption in parabolic quantum wells*.
Physical Review Letters, **40** (1989), 15.
- [3] John F. Dobson, *Harmonic Potential Theorem: Implication for Approximate Many-Body Theories*.
Physical Review Letters, **73** (1994), 16.
- [4] Volker Peukert, *A new approximation method for electron system*.
Journal of Physics C: Solid State Physics, **11** (1978).
- [5] D.A. Broido, K. Kempa e P. Bakshi, *Self-consistent far-infrared response of quantum-dot structures*.
Physical Review B, **42** (1990), 17.
- [6] E.G. Gwinn, R.M. Westervelt, P.F. Hopkins e A.J. Rimberg, *Quantum Hall effect in parabolic GaAs/Al_xGa_{1-x}As wells*.
Physical Review B, **39** (1989), 9.
- [7] Chen Jin-Wang et al., *A new proof of the Harmonic-Potential Theorem*.
Chin. Physics Letters, **30** (2013), 2.
- [8] Meng-Yun Lai e Xiao-Yin Pan, *The generalized harmonic potential theorem in the presence of a time-varying magnetic field*.
Scientific Reports, (2016).
- [9] Shihang Shen, Haozhao Liang, Jie Meng, Peter Ring, Shuangquan Zhang, *Relativistic Brueckner-Hartree-Fock theory for neutron drops*.
(2018)

BIBLIOGRAFIA

- [10] S. Gandolfi, J. Carlson, Steven C. Pieper, *Cold Neutrons Trapped in External Fields*.
Physical Review Letters, **106** (2011)
- [11] Viraht Sahni, *Quantal Density Functional Theory*.
Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2003, 2016
- [12] Peter Ring e Peter Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*.
Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1980.
- [13] P. Hohenberg e W. Kohn, *Inhomogeneous Electron Gas*.
Physical Review, **136** (1964), 3B.
- [14] Michael Bender e Paul-Henri Heenen, *Self-consistent mean-field models for nuclear structure*.
Reviews of Modern Physics, **75** (2003).
- [15] John F. Dobson, M.J. Bunner e E.K.U. Gross, *Time-Dependent Density Functional Theory beyond Linear Response: an Exchange-Correlation Potential with Memory*.
Physical Review letters, **79** (1997), 10.
- [16] Gianluca Colò, Ligang Cao, Nguyen Van Giai, Luigi Capelli, programma *skyrme_rpa*
Computer Physics Communications
- [17] S.K.Yip, *Magneto-optical absorption by electrons in the presence of a parabolic quantum confinement potentials*.
Physical Review B, **43** (1991), 2.
- [18] Erich Runge e E.K.U. Gross, *Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems*.
Physical Review Letters, **52** (1984), 997.
- [19] G.F.Bertsch e S.F.Tsai, *A Study of the Nuclear Response Function*.
Physics Reports, textbf18 (1975), 2.
- [20] D. Vautherin, *Hartree-Fock Calculations with Skyrme Interaction. Spherical Nuclei*.
Physical Review C, **5** (1972), 3.
- [21] R.A.Brogia, G.Colò, G.Onida, H.E.Roman, *Solid State Physics of Finite Systems*.
Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2004.

BIBLIOGRAFIA

- [22] B.S.Pudliner et Al., *Neutron Drops and Skyrme Energy-Density Functionals*.
Physical Review Letters, **76** (1996), 2416.
- [23] S.K.Bogner, R.J.Furnstahl et Al., *Testing the density matrix expansion against ab initio calculations of trapped neutron drops*.
Physical Review C, **84** (2011), 44306.
- [24] Luigi E. Picasso, *Lezioni di Meccanica Quantistica*.
Edizioni ETS, 2015.
- [25] J.Dobaczewski, H.Flocard e J.Treiner, *Hartree-Fock-Bogolyubov description of nuclei near the neutron-drip line*.
Nuclear Physics A, **422** (1984), 103.
- [26] E.Chabanat, P.Bonche, P.Haensel, J.Meyer, R.Schaeffer, *A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part. II. Nuclei far from stabilities*.
Nuclear Physics A, **635** (1998), 231.
- [27] Eisenberg, Greiner, *Nuclear Models, collective and single-particle phenomena*.
North-Holland, 1970.