



UNIVERSITÀ DEL SALENTO
DIPARTIMENTO DI MATEMATICA E FISICA
”ENNIO DE GIORGI”

Corso di laurea in Fisica

TESI DI LAUREA

Deformazioni e Cluster Metallici

Deformations and Metal Clusters

Relatore:

Prof. Giampaolo CO'

Laureando:

Marco COLACI

Indice

1	Introduzione	5
2	Tecniche sperimentali	9
2.1	Produzione di Cluster Metallici	9
2.1.1	Seeded Supersonic Nozzle source	10
2.1.2	Gas Aggregation source	11
2.1.3	Laser Vaporization source	11
2.1.4	Sputtering source	12
2.2	Rivelazione di Cluster	13
2.2.1	Filtro di Wien	14
2.2.2	Quadrupole mass filter	15
2.2.3	Time of Flight (TOF) mass spectrometer	16
3	Teoria	19
3.1	Calcolo della Deformazione	20
3.2	Equazione di Schrödinger	23
3.2.1	Potenziale Oscillatore Armonico	23
3.2.2	Potenziale Woods-Saxon	27
4	Risultati	31
4.1	Introduzione	31
4.2	Dettagli Calcolo	32
4.3	Risultati	33
4.3.1	Caso Sferico	35

4.3.2	Caso Deformato	38
5	Conclusioni	45

Capitolo 1

Introduzione

I Cluster Metallici, CM d'ora in poi, sono un'insieme di atomi di sostanze metalliche, il cui numero può variare da poche decine fino a qualche migliaia. Nel loro libro [Rei04], P. G. Reinhard e E. Suraud affermano che i CM “ ... constitute, so to say, a bridge between microscopic and macroscopic worlds.”.

Lo studio dei CM apre quindi una via all'interpretazione delle proprietà fisiche di sistemi macroscopici a partire da sistemi meglio conosciuti e descritti: gli atomi e le molecole. È questo aspetto ad aver promosso, negli ultimi anni, numerosi studi a riguardo.

Nella produzione dei CM una delle prime osservazioni consiste, per un dato meccanismo di formazione, nello studio della numerosità di CM in funzione della loro massa, cioè in funzione del numero N di atomi che li compongono.

La figura (1.1) mostra lo spettro di massa dei Cluster di sodio. Nell'esperimento viene osservato come la produzione dei CM varia in funzione del numero degli atomi di sodio che lo compongono, si noti che la sua numerosità è significativamente elevata in corrispondenza di alcuni valori di N . Verosimilmente, la maggiore probabilità di formazione del Cluster è associata a valori del numero di atomi per i quali il sistema risulta essere maggiormente stabile. Negli atomi o nelle molecole si osserva particolare stabilità quando le shell di energia della configurazione elettronica sono completamente riempite. Si suppone che questo ragionamento possa essere applicato anche ai CM.

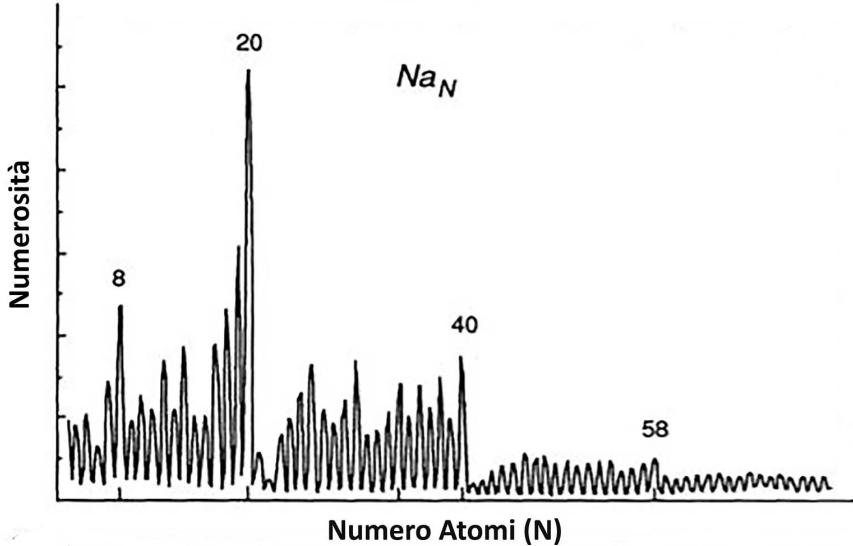


Figura 1.1: Spettro di massa di Cluster di sodio. Numero di CM osservati in funzione del numero N degli atomi che lo compongono [Hee93].

Descrivere i CM dal punto di vista quantitativo significa risolvere un problema a multi-corpi. I metodi più accurati per fare ciò sono basati sulla chimica quantistica o sulla dinamica molecolare, i quali implicano calcoli molto onerosi in termini di tempo macchina, anche per sistemi di pochi atomi. Un modello che in parte semplifica il problema è il modello *Jellium*, il quale approssima la struttura del nocciolo ionico del CM con una distribuzione uniforme di carica positiva che genera un potenziale medio nel quale sono confinati gli elettroni di valenza. Sfruttando l'approccio del *Jellium* si ottiene un modello che è in grado di fornire risultati quantitativi senza implicare calcoli troppo costosi dal punto di vista computazionale. Questo modello approssima quindi il CM formato da N atomi con un campo medio, prodotto da una distribuzione di carica positiva uniforme, nel quale sono confinati gli elettroni di valenza, considerati quasi liberi e tra loro indipendenti. Lo stato fondamentale del sistema è descritto allocando gli elettroni di valenza tra i livelli energetici di singola particella prodotti dal potenziale a partire dal livello ad energia minore, e nel rispetto del principio di Pauli, essendo gli elettroni dei fermioni, e di conseguenza essendo soggetti alla statistica di Fermi-Dirac.

Obiettivo della tesi è quello di comprendere perché, nello spettro di massa del Cluster di sodio (figura (1.1)), la numerosità è particolarmente elevata, ossia presenta dei picchi, in corrispondenza di particolari valori del numero N degli atomi che formano il CM. In virtù del modello esposto, l'ipotesi è che quei valori di N corrispondano alla saturazione dei livelli energetici di

singola particella prodotti dal campo medio. Per verificare la validità di tale ipotesi viene fatto un confronto delle previsioni ottenute dall'analisi teorica dei CM eseguita in questa tesi, con lo spettro di massa sperimentale noto.

Tuttavia è necessario considerare che il modello presentato, come approfondiremo nell'apposito capitolo, risulta adeguato solo per descrivere i Cluster di metalli alcalini, quindi saranno i soli tipi di CM che prenderemo in considerazione in questo studio.

Nel Capitolo 2 analizzo i più utilizzati metodi sperimentali per la produzione e l'analisi dei CM e come questi influiscano sullo spettro di massa prodotto. Nel Capitolo 3 presento, nel dettaglio, il modello utilizzato per la descrizione del problema fisico e la sua risoluzione. Nel Capitolo 4 si espongono i dettagli del calcolo numerico e i risultati ottenuti. Infine nell'ultimo Capitolo riassumo il lavoro fatto, ne traggo alcune conclusioni, e formulo alcune prospettive per sviluppi futuri.

Capitolo 2

Tecniche sperimentali

Lo studio sistematico dei CM è avvenuto soltanto recentemente, nella seconda metà del '900, grazie alla possibilità di poterli studiare in ambienti privi di interazioni esterne. Questo passo, fondamentale e necessario per la comprensione delle loro proprietà è stato ottenuto con lo sviluppo tecnologico delle sorgenti, che attualmente consentono di produrre fasci di CM a partire da un qualunque elemento chimico. La nostra attenzione si concentrerà sui CM prodotti da atomi di metalli alcalini, e questo perché, come vedremo nel capitolo successivo, sono quelli che meglio vengono approssimati dal modello che prendiamo in esame.

Non solo la produzione, ma anche la rivelazione e l'analisi delle loro caratteristiche, presentano problemi tecnici da affrontare, primo dei quali è che essi possono essere composti da un numero molto variabile di atomi e ciò si ripercuote sulle masse e sulle dimensioni che conseguentemente possono variare in un ampio range di valori.

Il nostro obiettivo è quello di studiare la numerosità dei CM, in funzione del numero di atomi costituenti, perciò non tratteremo i metodi di rivelazione in generale ma soltanto gli spettrometri di massa, ossia quei rivelatori che permettono di selezionare CM con precisi valori di massa.

2.1 Produzione di Cluster Metallici

I metodi di produzione di CM possono essere classificati in due differenti categorie: per aggregazione di particelle, nel nostro caso di atomi di metalli alcalini, o per disgregazione di un macrosistema. Di seguito presenterò le più comuni tipologie di sorgenti, analizzandone funzio-

namento e costruzione, ma soprattutto volgendo una particolare attenzione a come queste, in base ai processi fisici coinvolti nella produzione, influiscano sullo spettro di massa.

2.1.1 Seeded Supersonic Nozzle source

Lo schema dell'apparato è riportato nella figura 2.1

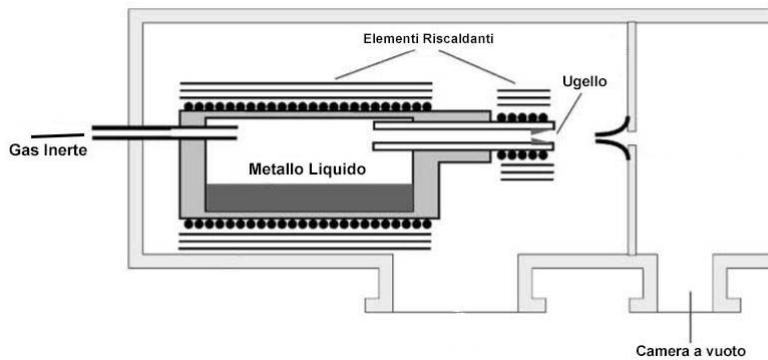


Figura 2.1: Schema dell'apparato Seeded Supersonic Nozzle Source ([Rei04], pag. 42)

La sorgente è composta da un serbatoio dotato di un tubo di input, e un tubo di output terminante in un piccolo ugello che collega il serbatoio ad una camera a vuoto. Il serbatoio viene riscaldato fino a che il metallo in esso contenuto non vaporizza. Successivamente, il vapore così prodotto viene mischiato con un gas inerte (ad alta pressione e a bassa temperatura) che viene fatto fluire all'interno del serbatoio, attraverso il tubo di input, per differenza di pressione (tipicamente il gas inerte si trova ad una pressione dell'ordine delle decine di *bar*, mentre il vapore di metallo si trova ad una pressione dell'ordine di $10 - 100 \text{ mbar}$). Il mix di vapore/gas ad alta pressione è fatto espandere adiabaticamente in una camera a vuoto attraverso il piccolo ugello; questo causa il raffreddamento del mix e, conseguentemente, la supersaturazione del vapore di metallo, si avvia così il processo di produzione di CM per condensazione.

L'espansione può essere sufficiente a raffreddare il CM fino a renderlo termodinamicamente stabile rispetto all'evaporazione; in caso contrario un ulteriore raffreddamento dei CM avviene attraverso l'evaporazione di uno o più atomi.

L'evidenza sperimentale indica che si verificano entrambi i processi, ma risulta difficile distinguergli perché entrambi producono risultati simili sullo spettro di massa. Infatti, in entrambi i

casi, lo spettro di massa è dettato dalla stabilità termodinamica dei CM ed è quindi funzione della loro energia di legame.

2.1.2 Gas Aggregation source

Nella figura 2.2 è rappresentato lo schema della sorgente.

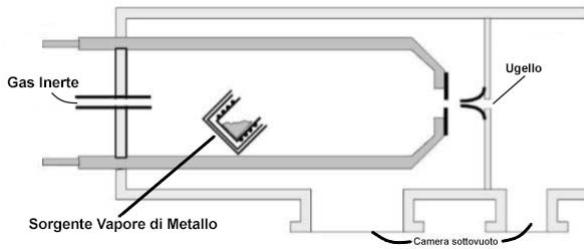


Figura 2.2: Schema dell'apparato Gas Aggregation Source ([Rei04], pag. 42)

L'apparato è formato da un serbatoio che viene riscaldato fino al punto di vaporizzare tutto il metallo in esso presente. Il serbatoio è situato all'interno di una camera a vuoto riempita di gas inerte ad una temperatura molto minore di quella del vapore. Il vapore dopo essere stato introdotto nel flusso di gas inerte freddo, diventa supersaturo e, favorito dalla bassa temperatura, si condensa formando i Cluster, i quali vengono infine espulsi in un'altra camera a vuoto, attraverso un ugello. Nella sorgente in esame, la clusterizzazione procede principalmente per condensazione successiva di singoli atomi, pertanto, il processo termodinamico inverso, ossia l'evaporazione, risulta trascurabile.

Questo si riflette sulla numerosità dei CM che perciò è indipendente dalla loro stabilità termodinamica, e quindi dalla loro energia di legame, ma dipende invece dalla loro dimensione.

2.1.3 Laser Vaporization source

Il principio di funzionamento del *Laser Vaporization source* è differente rispetto alle sorgenti descritte in precedenza. In questo caso, infatti, la produzione di CM avviene frammentando un macrosistema e successivamente favorendo l'aggregazione di tali frammenti. Il macrosistema in questione è un'asta di metallo che viene disgregata utilizzando una tecnica di ablazione con laser pulsato.

Nella figura 2.3 è rappresentato lo schema della sorgente in questione. Essa è formata da un asta di metallo che, situata all'interno di un serbatoio, viene colpita da un laser pulsato che la vaporizza. Per evitare la perforazione del bersaglio, l'asta viene fatta ruotare in modo che il fascio non incida sempre sullo stesso punto.

Un flusso di elio freddo a bassa pressione, che è introdotto nel serbatoio attraverso una *Pulse Valve*, ingloba il vapore di metallo e, a causa della sua bassa temperatura, lo raffredda e lo rende supersaturo avviando la formazione dei CM per condensazione. Il flusso di elio e CM viene ulteriormente raffreddato (fino alla temperatura di pochi Kelvin), per renderlo termodinamicamente stabile, facendolo espandere adiabaticamente in una camera a vuoto attraverso un piccolo ugello.

È evidente che il processo di raffreddamento e stabilizzazione del fascio, attraverso l'espansione adiabatica, è equivalente a quello del *Seeded Supersonic Nozzle source*, quindi risultano valide le considerazioni già fatte riguardo lo spettro di massa.

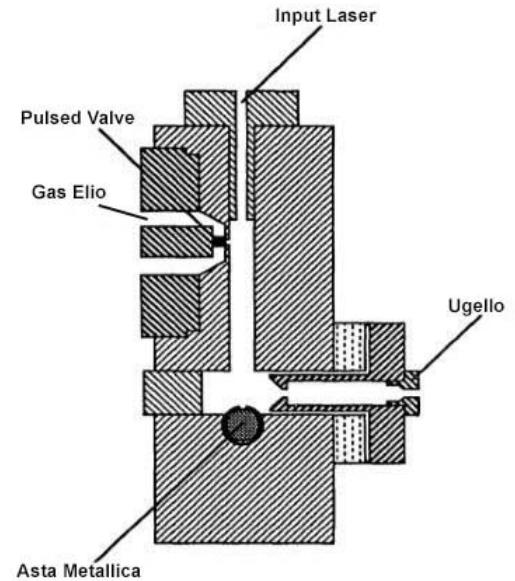


Figura 2.3: Schema dell'apparato Laser Vaporization Source ([Hee93], pag. 620).

2.1.4 Sputtering source

La *Sputtering source* è basata sullo stesso principio della *Laser Vaporization source*, con la differenza che il sistema target è una lastra di metallo e la disgregazione è eseguita ad opera di un fascio di ioni ad alta energia, e non di un fascio laser.

Il fascio è prodotto in una sorgente di ioni collegata alla camera principale nella quale è situata la superficie da bombardare. Quest'ultima sorgente, attraverso una differenza di potenziale, trasforma il gas in ioni con energia dell'ordine dei keV, i quali vengono successivamente fatti incidere sulla superficie target. I CM ionici sono prodotti a seguito dell'impatto che causa l'espulsione di aggregati di atomi metallici carichi dal bersaglio.

A seconda del modello di *Sputtering source* scelto, esistono vari modi per favorire e incrementare la formazione dei CM a partire dal materiale espulso.

Un metodo è quello di focalizzarli attraverso un'ottica ionica e farli passare, successivamente, attraverso un filtro di energia per generare un fascio monoenergetico; questo è il modello presentato nella figura (2.4). I CM ionici prodotti dal bombardamento hanno una temperatura elevata, in questo metodo, il loro raffreddamento, necessario per renderli termodinamicamente stabili, avviene durante il tempo di volo attraverso il processo di evaporazione.

Un secondo metodo consiste nel far fluire all'interno della camera principale un gas inerte che si mischia con i CM prodotti a seguito del bombardamento della superficie favorendone la produzione. Il processo da questo punto in poi prosegue in modo analogo a quello già visto nella *Seeded Supersonic Nozzle*.

Osserviamo come entrambi i metodi coinvolgono processi termodinamici di condensazione ed evaporazione. Questo implica che la numerosità dei CM è sensibile alla loro stabilità termodinamica, e quindi lo spettro di massa prodotto sarà dipendente dalla energie di legame.

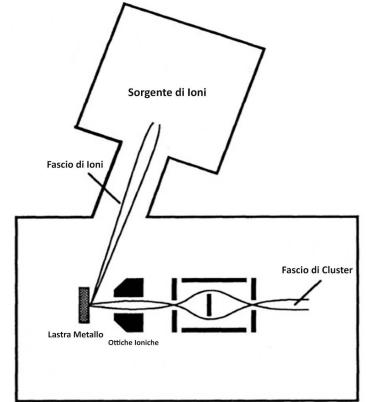


Figura 2.4: Schema dell'apparato Sputtering source ([Hee93], pag. 621).

2.2 Rivelazione di Cluster

La rivelazione del numero di atomi che formano i CM viene attuata utilizzando lo spettrometro di massa. Esistono due principali classi di spettrometri di massa, quelli costruiti con campi elettromagnetici variabili e quelli costruiti con campi elettromagnetici stazionari, ossia indipendenti dal tempo. Analizzo nel seguito solo le tipologie più comuni.

2.2.1 Filtro di Wien



Figura 2.5: Schema del Filtro di Wien ([Hee93], pag. 622).

Il filtro di Wien è uno tra i più semplici spettrometri e negli esperimenti sui CM permette di selezionare quelli con un preciso valore di massa; nella figura 2.5 è presentato il suo schema.

Il filtro è realizzato inserendo, all'interno di un tubo a vuoto in cui è presente un campo magnetico uniforme, un condensatore piano carico che genera un campo elettrico in buona approssimazione uniforme tra le armature. Il condensatore è posizionato in modo che i due campi siano tra essi perpendicolari. Il fascio di CM ionizzati è accelerato attraverso una differenza di potenziale e successivamente viene fatto passare attraverso il filtro in direzione perpendicolare sia al campo elettrico sia al campo magnetico.

Il fascio è formato da particelle cariche e accelerate che attraversano un campo elettromagnetico, pertanto su di esso agisce la forza di Lorentz.

I CM procedono in linea retta se e solo se la somma delle forze agenti su di essi è nulla. Analizzando il singolo CM del fascio di massa M , carica Q e velocità v , tale condizione si verifica quando:

$$F_E = F_B \iff QE = Q\left(\frac{v}{c} \times B\right) \implies v = \frac{Ec}{B} . \quad (2.1)$$

Nell'equazione precedente ho indicato con F_E e F_B le componenti della forza elettrica e della forza di Lorentz nella direzione del moto del CM, e con E e B le componenti del campo elettrico e di quello magnetico; c è la velocità della luce.

Il Cluster è stato accelerato attraverso una differenza di potenziale V , pertanto:

$$T = \frac{1}{2}Mv^2 = QV \implies \frac{M}{Q} = 2\frac{V}{v^2} , \quad (2.2)$$

dove con T è stata indicata l'energia cinetica del Cluster.

Sostituendo in quest'ultima equazione, la relazione (2.1), ottengo:

$$\frac{M}{Q} = 2V \left(\frac{B}{Ec} \right)^2 , \quad (2.3)$$

quindi i CM per i quali vale questa relazione non vengono deflessi; essi vengono selezionati posizionando alla fine del filtro un collimatore. In questo modo si è ottenuto un selettore di massa, o più precisamente del rapporto massa/carica (M/Q).

Il filtro di Wien tipicamente ha un risoluzione $\delta M/M \approx 10^{-2}$. Il range di valori di massa analizzabile è mediamente $1 - 5000$ amu. Questi limiti dipendono principalmente dalla forza del campo elettrico e magnetico del filtro e dagli effetti causati dalle differenti velocità iniziali dei CM.

2.2.2 Quadrupole mass filter

Il Quadrupole mass filter seleziona i CM con precisi valori del rapporto massa/carica (M/Q) sfruttando un campo elettrico con una componente di corrente alternata (AC) sovrapposta ad una componente di corrente continua (DC). Nella figura (2.6) è rappresentato lo schema del filtro. Esso è formato da quattro aste di metallo parallele all'interno di un tubo a vuoto. A due aste opposte è applicato un potenziale dipendente dal tempo $U + V \cos(\omega t)$, alle altre due aste è invece applicato il potenziale con frequenza opposta, dalla forma $-(U + V \cos(\omega t))$.

All'interno del tubo viene fatto passare un fascio di CM ionizzati e accelerati (il fascio è precedentemente accelerato applicandovi un potenziale) la sua traiettoria è influenzata dal campo elettrico presente. Risolvendo le equazioni del moto del fascio risulta che, fissata la frequenza ω e le ampiezze U e V del potenziale applicato, solo i CM con un preciso valore del rapporto massa/carica (M/Q) mantengono una traiettoria stabile durante la propagazione, ossia non subiscono deviazione, mentre gli altri vengono deflessi fino a collidere con le aste.

Questo dispositivo permette perciò di selezionare particelle con precisi valori del rapporto massa/carica variando la frequenza del potenziale ω e fissando le ampiezze U e V o viceversa, fissando la frequenza e variando le ampiezze.

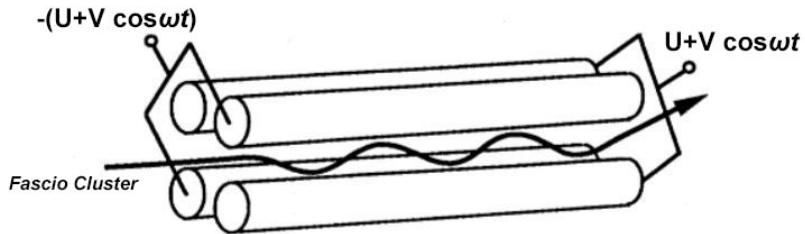


Figura 2.6: Quadrupole mass filter ([Hee93], pag. 623).

2.2.3 Time of Flight (TOF) mass spectrometer

Lo spettrometro Time of Flight permette di selezionare CM con precisi valori del rapporto massa/carica (M/Q), ma a differenza dei filtri descritti in precedenza, esso non si basa sull'idea di generare dei campi di forza che lascino invariata la traiettoria delle particelle cercate e deflettano le altre; si basa invece sull'idea di registrare il tempo di propagazione delle particelle in esame e da quest'ultimo ricavare il valore del rapporto M/Q .

Lo schema dello spettrometro è rappresentato in figura (2.7).

Il fascio di CM neutri viene prima ionizzato, sfruttando un laser ultravioletto o un fascio di elettroni, e successivamente accelerato facendolo passare attraverso un campo elettrico uniforme generato da un condensatore. I CM sono poi lasciati liberi di propagarsi in una regione priva di campo elettrico, il tubo di volo, per poi collidere su un rivelatore di ioni; il loro tempo di arrivo è registrato, ad esempio, da un oscilloscopio.

Dal tempo di volo della particella ricaviamo il relativo rapporto massa/carica (M/Q). Il CM ionizzato, di carica Q e massa M , attraversando il campo elettrico di potenziale V , acquisisce un'energia pari a

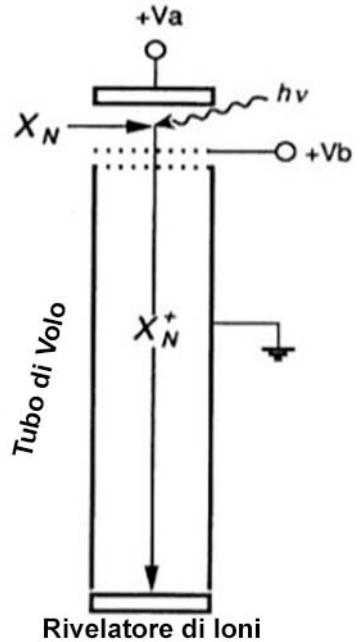


Figura 2.7: Schema dello spettrometro Time of Flight ([Hee93], pag. 623).

$$T = \frac{Mv^2}{2} = QV \implies \frac{M}{Q} = \frac{2V}{v^2} \quad (2.4)$$

dove v è la velocità costante con cui si propaga il CM nel tubo di volo.

L'equazione sopra dimostra che esiste una relazione univoca tra v e il rapporto massa/carica.

Dal tempo di volo del singolo Cluster, fissata la lunghezza del tubo di volo (D), si ottiene la velocità v , dalla quale, tramite la relazione (2.4), si ottiene il rapporto massa/carica (M/Q).

Capitolo 3

Teoria

L'analisi dello spettro di massa sperimentale dei CM fornisce alcune osservazioni interessanti. La prima è che in corrispondenza di alcuni valori del numero N di atomi la numerosità è maggiore, questo significa che per tali valori la formazione del CM è più probabile. È ragionevole pensare che questo avvenga in corrispondenza dei CM con maggiore stabilità ossia con maggiore energia di legame. In analogia con il modello atomico a campo medio, e con il modello a shell nucleare, ipotizziamo quindi che quei numeri di atomi per i quali la stabilità è maggiore corrispondano alla saturazione dei livelli energetici di singola particella prodotti da una qualche tipologia di potenziale medio.

L'idea di fondo del presente studio è quella di poter approssimare il singolo CM formato da N atomi con un campo medio generato da un background di ioni con singola carica positiva.

Limite questo studio ai soli Cluster di atomi dei metalli alcalini perché in essi gli elettroni di valenza sono fortemente delocalizzati rispetto al nocciolo ionico.

Il CM è descritto secondo il modello *Jellium* (per approfondimenti vedere [Bra93]) in cui il contributo del nocciolo ionico genera un potenziale medio a cui sono soggetti gli elettroni di valenza. I livelli energetici di singola particella prodotti dal campo medio sono riempiti allocando gli elettroni di valenza, uno per ogni atomo alcalino che forma il CM, compatibilmente con il principio di Pauli.

In questo lavoro considererò due diverse espressioni analitiche del potenziale medio: una prima espressione tipo oscillatore armonico, ed un'altra tipica della fisica nucleare, il potenziale Woods-Saxon. Il confronto tra i risultati ottenuti con le due tipologie di potenziale permetterà di

valutare se i risultati del modello a campo medio, sfruttato per descrive i CM, sono influenzati dalla scelta della tipologia di potenziale.

Il primo approccio è quello di considerare il sistema come avente simmetria sferica. D'altra parte è noto dalla fisica atomica e nucleare che in situazioni in cui un singolo livello energetico non completamente riempito è degenero in un potenziale a simmetria sferica si produce una deformazione per eliminare la degenerazione. Questo effetto è noto in letteratura come effetto Jahn-Teller [Jah37].

Nella mia investigazione prenderò in considerazione anche la deformazione con l'intento di valutare come questa influisca sulla sequenza dei livelli energetici e quindi conseguentemente sulle previsioni dello spettro di massa.

3.1 Calcolo della Deformazione

La teoria che prensero in questo paragrafo è stata sviluppata, in origine, da Nilsson [Nil01] per descrivere i nuclei deformati. Qui ne presento una versione modificata che si adatti al caso in esame. Seguirò la trattazione presentata in [Rin80] (pag. 68-69), utilizzata per i nuclei atomici. Adotto un modello a goccia di liquido incompressibile, e considero, quindi, il CM prodotto da una deformazione della sfera, deformazione che mantiene costante il volume. Un punto sulla superficie della goccia può essere espresso con uno sviluppo in armoniche sferiche $Y_{\mu\lambda}$ partendo dal raggio della sfera R_0 :

$$R(\theta, \phi) = R_0 \left(1 + \sum_{\lambda=0}^{\lambda} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} a_{\mu\lambda}^* Y_{\mu\lambda}(\theta, \phi) \right) , \quad (3.1)$$

dove

$a_{\mu\lambda}$ sono i coefficienti dello sviluppo.

Trascuro i termini $\lambda = 0$ e $\lambda = 1$. Il primo descrive un compressione della sfera, ed il secondo una traslazione. La prima vera deformazione è quella con $\lambda = 2$ che descrive un ellissoide di rotazione attorno all'asse z di simmetria:

$$R(\theta, \phi) = R_0 (1 - \alpha_{20} Y_{20}(\Omega)) , \quad (3.2)$$

dove α_{20} è un parametro che rappresenta l'entità della deformazione rispetto alla configurazione sferica.

Una variazione della distribuzione di materia implica una variazione della forma del potenziale medio, quindi una distribuzione ellissoidale della densità significa che anche il campo medio avrà la stessa distribuzione.

Nella seguente parte di questo paragrafo mostro come in un potenziale di tipo oscillatore armónico deformato con simmetria ellissoidale, emerga un termine proporzionale a Y_{20} . In questo caso, l'hamiltoniana che descrive il moto di un elettrone di valenza in questo potenziale assume la forma

$$h_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) , \quad (3.3)$$

dove ho indicato con m la massa dell'elettrone di valenza, e con $\omega_{x,y,z}$ le frequenze nelle tre coordinate cartesiane.

Definisco $\tilde{\omega} = \omega_x = \omega_y = \omega_z$ la frequenza dell'oscillatore nella configurazione sferica. In caso di deformazione a volume costante posso definire le relazioni:

$$\omega_\nu = \tilde{\omega}_0 \frac{R_0}{a_\nu} \iff \frac{\omega_\nu}{\tilde{\omega}_0} = \frac{R_0}{a_\nu} \quad (\nu = x, y, z) . \quad (3.4)$$

dove ho indicato con a_ν i semiassi della distribuzione ellissoidale.

Posso riscrivere la condizione di conservazione del volume in funzione delle frequenze sfruttando l'equazione (3.4) :

$$\frac{R_0}{a_x} \frac{R_0}{a_y} \frac{R_0}{a_z} = 1 \iff \omega_x \omega_y \omega_z = \text{costante} . \quad (3.5)$$

Nei problemi con simmetria assiale, come quello in esame, convenzionalmente si sceglie l'asse z come asse di simmetria e si introduce il parametro di deformazione δ nel seguente modo:

$$\begin{aligned} \omega_\perp^2 &= \omega_x^2 = \omega_y^2 = \omega_0^2(\delta) \left(1 + \frac{2}{3}\delta\right) , \\ \omega_z^2 &= \omega_0^2(\delta) \left(1 - \frac{4}{3}\delta\right) . \end{aligned} \quad (3.6)$$

Nelle espressioni precedenti, la deformazione è definita in termini di un solo parametro, δ , poiché il valore dell'altra costante, $\omega_0(\delta)$, viene determinato in modo da garantire la conservazione del volume.

L'hamiltoniana (3.3) è composta dal termine di energia cinetica

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 , \quad (3.7)$$

e da quello di energia potenziale, che posso riscrivere utilizzando l'equazione (3.6)

$$\begin{aligned} V &= \frac{m}{2} [\omega_{\perp}^2(x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2] \\ &= \frac{m}{2} \omega_0^2(\delta) \left[\left(1 + \frac{2}{3}\delta\right) (x^2 + y^2) + \left(1 - \frac{4}{3}\delta\right) z^2 \right] \\ &= \frac{m}{2} \omega_0^2(\delta) \left[\left(1 + \frac{2}{3}\delta\right) (\mathbf{r}^2 - z^2) + \left(1 - \frac{4}{3}\delta\right) z^2 \right] \\ &= \frac{m}{2} \omega_0^2(\delta) \left[\mathbf{r}^2 - z^2 + \frac{2}{3}\mathbf{r}^2\delta - \frac{2}{3}\delta z^2 + z^2 - \frac{4}{3}\delta z^2 \right] = \frac{m}{2} \omega_0^2(\delta) \left[\mathbf{r}^2 \left(1 + \frac{2}{3}\delta\right) - 2\delta z^2 \right] \\ &= \frac{m}{2} \omega_0^2(\delta) \left[\mathbf{r}^2 \left(1 + \frac{2}{3}\delta\right) - 2\mathbf{r}^2\delta \cos^2 \theta \right] = \frac{m}{2} \omega_0^2(\delta) \mathbf{r}^2 + \frac{m}{3} \omega_0^2(\delta) \mathbf{r}^2\delta (1 - 3 \cos^2 \theta) . \end{aligned} \quad (3.8)$$

Poiché

$$Y_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

definisco

$$\bar{\beta} = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \delta$$

e ottengo la seguente espressione dell'hamiltoniana

$$h_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{m}{2} \omega_0^2(\delta) \mathbf{r}^2 - m \omega_0^2(\delta) \mathbf{r}^2 \bar{\beta} Y_{20} \quad (3.9)$$

approssimo $\omega_0(\delta)$ con la costante ω_0 e in riferimento all'equazione (3.2), per analogia, considero il termine $\omega_0^2 \mathbf{r}^2 \bar{\beta}$ costante.

Quindi, in prima approssimazione, l'hamiltoniana dell'oscillatore armonico anisotropo può

essere espressa come

$$h_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m}{2}\omega_0^2\mathbf{r}^2 - \beta Y_{20} \quad (3.10)$$

dove, qui, β è una costante dalle dimensioni dell'energia.

3.2 Equazione di Schrödinger

Nel nostro modello, l'equazione di Schrödinger, che descrive il moto di ogni elettrone di valenza in un CM sferico, è

$$h\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}) \quad , \quad (3.11)$$

dove $V(r)$ indica il generico potenziale centrale. Posso esprimere la funzione d'onda $\psi(\mathbf{r})$ come

$$\psi_{nl\mu\sigma}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{l\mu}(\Omega)\chi_{\sigma} \quad . \quad (3.12)$$

dove $R_{nl}(r)$ rappresenta la parte radiale e χ_{σ} lo spinore di Pauli.

Utilizzando la ben nota tecnica di separazione delle variabili ([Coh91]) l'equazione di Schrödinger diventa un'equazione differenziale di una singola variabile

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1) + V(r)\right]R_{nl}(r) = \varepsilon_{nl}R_{nl}(r) \quad . \quad (3.13)$$

Nelle due sottosezioni successive risolvo l'equazione (3.13) per il potenziale tipo oscillatore armonico e per quello tipo Woods-Saxon.

3.2.1 Potenziale Oscillatore Armonico

L'espressione analitica del potenziale di Oscillatore Armonico è:

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega_0^2r^2 \quad (3.14)$$

dove, come già presentato nel paragrafo precedente, ho indicato con m la massa della particella e con ω_0 la frequenza angolare dell'oscillatore armonico. L'equazione di Schrödinger radiale per

questo potenziale è

$$h_0^{HO} R_{nl}^{HO}(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) + \frac{1}{2} m\omega_0^2 r^2 \right) R_{nl}^{HO}(r) = \varepsilon_{nl}^{HO} R_{nl}^{HO}(r) , \quad (3.15)$$

la parte radiale della funzione d'onda di oscillatore armonico sferico è [Coh91]

$$R_{nl}^{HO} = \sqrt{\frac{2(n-1)!}{\Gamma(n+l+\frac{1}{2})b^3}} \left(\frac{r}{b}\right)^l e^{\frac{r^2}{2b^2}} L_{n-1}^{l+1/2} \left(\frac{r^2}{b^2}\right) \quad (3.16)$$

dove $L_{n-1}^{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{r^2}{b^2}\right)$ indica il polinomio di Laguerre generalizzato e $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ rappresenta la lunghezza dell'oscillatore.

Gli autovalori dell'hamiltoniana dell'oscillatore armonico sono ([Rin80], pag. 41)

$$\varepsilon_{nl}^{HO} = \hbar\omega \left(2(n-1) + l + \frac{3}{2} \right) . \quad (3.17)$$

Le soluzioni di questa equazione presentano degenerazione in μ e nello spin, quindi ogni livello energetico è $2(2l+1)$ degenere. Si verifica inoltre una degenerazione accidentale per alcuni livelli aventi lo stesso valore di energie ma identificati da una diversa coppia di numeri quantici n, l .

Inserisco ora il termine di deformazione βY_{20} ottenuto nel paragrafo precedente. La presenza di deformazione rompe la simmetria centrale del problema, quindi l'utilizzo della tecnica di separazione delle variabili non permette di ottenere un'equazione differenziale che dipenda esclusivamente da r .

L'equazione di Schrödinger da risolvere è

$$h\psi_{nl\mu}(\mathbf{r}) = (h_0^{HO} - \beta Y_{20}) \psi_{nl\mu}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{nl\mu} \psi_{nl\mu}(\mathbf{r}) , \quad (3.18)$$

dove

$$h_0^{HO} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 r^2 . \quad (3.19)$$

Risolvo l'equazione con il metodo di sviluppo delle autofunzioni su base discreta di oscillatore armonico sferico, la quale ha la seguente espressione

$$|nl\mu\rangle^{HO} \equiv \phi_{nl\mu}^{HO}(\mathbf{r}) = R_{nl}^{HO}(r)Y_{l\mu}(\Omega) \quad , \quad (3.20)$$

dove la parte radiale è la (3.16) e la parte angolare è l'armonica sferica. Sviluppo la funzione $\psi_{nl\mu}(\mathbf{r})$ come combinazione lineare di autofunzioni di oscillatore armonico sferico:

$$\psi_{nl\mu}(\mathbf{r}) = \sum_k a_k \phi_{kl\mu}^{HO}(\mathbf{r}) = \sum_k a_k R_{kl}^{HO}(r)Y_{l\mu}(\Omega) \quad . \quad (3.21)$$

L'equazione di Schrödinger (3.18) viene riscritta sfruttando la relazione (3.21)

$$h\psi_{nl\mu}(\mathbf{r}) = \sum_k a_k (h_0^{HO} - \beta Y_{20}) \phi_{kl\mu}^{HO}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{nl\mu} \sum_k a_k \phi_{kl\mu}^{HO}(\mathbf{r}) \quad , \quad (3.22)$$

Per preservare la generalità della trattazione è necessario proiettare la relazione (3.22) sul generico autostato $|n'l'\mu'\rangle$. Per l'ortonormalità delle autofunzioni di oscillatore armonico i termini $n \neq n'$, $l \neq l'$ e $\mu \neq \mu'$ non influenzano l'hamiltoniana h_0^{HO} . Questi, per l'ortonormalità delle funzioni radiali $R^{HO}(r)$ dell'oscillatore armonico, non hanno effetto neanche sulla parte radiale del termine di deformazione.

L'ortonormalità delle funzioni d'onda dell'oscillatore armonico è considerata proiettando la relazione (3.22) sull'autostato $|nl\mu\rangle^{HO}$. Questo equivale a moltiplicare a sinistra per $\phi_{nl\mu}^{*HO}(\mathbf{r})$ e integrare su \mathbf{r}

$$\sum_k a_k \int d^3r \phi_{nl\mu}^{*HO}(\mathbf{r}) (h_0 - \beta Y_{20}) \phi_{kl\mu}^{HO}(\mathbf{r}) = \int d^3r \phi_{nl\mu}^{*HO}(\mathbf{r}) \varepsilon_{nl\mu} \sum_k a_k \phi_{kl\mu}^{HO}(\mathbf{r}) \quad . \quad (3.23)$$

Per semplificare i calcoli sfrutto le proprietà di ortonormalità delle autofunzioni dell'oscillatore armonico $|nl\mu\rangle^{HO}$

$$a_n \varepsilon_{nl}^{HO} - \beta \sum_k a_k \int d^3r \phi_{nl\mu}^{*HO}(\mathbf{r}) Y_{20}(\Omega) \phi_{kl\mu}^{HO}(\mathbf{r}) = a_n \varepsilon_{nl\mu} \quad . \quad (3.24)$$

Nella relazione sopra esposta il solo termine irrisolto è il terzo, l'integrale relativo alla deforma-

zione, quindi lo analizzo separatamente

$$\begin{aligned} \int d^3r \phi_{nl\mu}^{*HO}(\mathbf{r}) Y_{20}(\Omega) \phi_{kl\mu}^{HO}(\mathbf{r}) &= \int dr r^2 R_{nl}^{HO}(r) R_{kl}^{HO}(r) \int d\Omega Y_{l\mu}^*(\Omega) Y_{20}(\Omega) Y_{l\mu}(\Omega) \\ &= \delta_{n,k} \langle l\mu | Y_{20} | l\mu \rangle . \end{aligned} \quad (3.25)$$

Il calcolo della parte angolare dell'integrale, che qui definisco come $\langle l\mu | Y_{20} | l\mu \rangle$ è svolto applicando il teorema di Wigner-Eckart, per praticità i coefficienti di Clebsch-Gordan saranno sostituiti dai simboli $3j$ di Wigner

$$\begin{aligned} \langle l\mu | Y_{20} | l\mu \rangle &= (-1)^{l-\mu} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ -\mu & 0 & \mu \end{pmatrix} \langle l | Y_2 | l \rangle \\ &= (-1)^\mu (2l+1) \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ -\mu & 0 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \end{aligned} \quad (3.26)$$

le proprietà dei simboli $3j$ permettono di concludere che il termine in esame è invariante rispetto alla trasformazione $\mu \rightarrow -\mu$, è quindi invariante rispetto al segno di μ .

Sfrutto il risultato (3.26), ottenuto, per riscrivere la relazione (3.24)

$$a_n \varepsilon_{nl}^{HO} - a_n \beta (-1)^\mu (2l+1) \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ -\mu & 0 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = a_n \varepsilon_{nl\mu} , \quad (3.27)$$

il termine a_n , presente in tutti i termini della relazione, può essere semplificato, e si ottiene quindi

$$\varepsilon_{nl}^{HO} - \beta (-1)^\mu (2l+1) \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ -\mu & 0 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \varepsilon_{nl\mu} . \quad (3.28)$$

Gli autovalori del potenziale di oscillatore armonico deformato sono:

$$\varepsilon_{nl\mu} = \hbar\omega \left(2(n-1) + l + \frac{3}{2} \right) - \beta(-1)^\mu (2l+1) \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ -\mu & 0 & \mu \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad (3.29)$$

i quali non presentano più la degenerazione in μ , che è stata eliminata dal termine di deformazione, ma conservano la degenerazione nello spin e rispetto al segno di μ . Ogni livello energetico risulta essere 4 volte degenere.

3.2.2 Potenziale Woods-Saxon

L'espressione analitica del potenziale tipo Woods-Saxon è

$$V(r) = \frac{V_0}{1 + \exp[(r - R_0)/a_0]} \quad (3.30)$$

dove V_0, R_0, a_0 sono rispettivamente l'ampiezza del potenziale, il raggio medio del CM e lo spessore della sua superficie. La simmetria centrale dello stesso permette di sfruttare la separazione delle variabili, come spiegato all'inizio di questa sezione, quindi l'equazione radiale di Schrödinger da risolvere è

$$h_0 R_{nl}(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V^{ws}(r) \right) R_{nl}(r) = \varepsilon_{nl}^{ws} R_{nl}(r) , \quad (3.31)$$

dove, per praticità di scrittura, con V^{ws} è stato indicato il potenziale tipo Woods-Saxon (3.30). Procedendo in maniera analoga al potenziale di oscillatore armonico risolvo l'equazione utilizzando la tecnica dello sviluppo delle autofunzioni su base di oscillatore armonico, esprimo quindi $R_{nl}(r)$ come combinazione lineare delle autofunzioni di oscillatore armonico (3.16). L'equazione (3.31) assume la seguente espressione

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V^{ws}(r) \right\} \sum_k a_k R_{kl}^{HO}(r) = \varepsilon_{nl}^{ws} \sum_k a_k R_{kl}^{HO}(r) . \quad (3.32)$$

Per ottenere gli autovalori di questa hamiltoniana, a partire da quelli già noti dell'oscillatore armonico, prendo in considerazione l'equazione di Schrödinger radiale dell'oscillatore armonico non deformato

$$\sum_k \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 r^2 - \varepsilon_{kl}^{HO} \right\} a_k R_{kl}^{HO}(r) = 0 \quad (3.33)$$

e la sottraggo all'equazione (3.32). Si ottiene così la seguente relazione

$$\sum_k \left(V^{ws} - \frac{1}{2} m\omega_0^2 r^2 + \varepsilon_{kl}^{HO} \right) a_k R_{kl}^{HO}(r) = \varepsilon_{nl}^{ws} \sum_k a_k R_{kl}^{HO}(r) . \quad (3.34)$$

Come spiegato in precedenza, per il potenziale di oscillatore armonico, trascurro l'effetto dei termini $n \neq n'$, $l \neq l'$ e $\mu \neq \mu'$, sfruttando l'ortonormalità delle autofunzioni di oscillatore armonico, pertanto moltiplico a sinistra per $R_{nl}^{*HO}(r)$ e integro su r

$$\begin{aligned} \int dr r^2 R_{nl}^{*HO}(r) \sum_k \left\{ V^{ws}(r) - \frac{1}{2} m\omega_0^2 r^2 + \varepsilon_{kl}^{HO} \right\} a_k R_{kl}^{HO} &= \\ \int dr r^2 R_{nl}^{*HO}(r) \varepsilon_{nl}^{ws} \sum_k a_k R_{kl}^{HO} & , \end{aligned} \quad (3.35)$$

sfrutto l'ortonormalità delle autofunzioni di oscillatore armonico per semplificare la relazione sopra e ottenere la (3.36).

Gli autovalori dell'hamiltoniana del potenziale tipo Woods-Saxon sono

$$\varepsilon_{nl}^{ws} = \varepsilon_{kl}^{HO} + \sum_k a_k \int dr r^2 R_{nl}^{*HO}(r) \left(V^{ws}(r) - \frac{1}{2} m\omega_0^2 r^2 \right) R_{kl}^{HO}(r) , \quad (3.36)$$

questi presentano la degenerazione nello spin e rispetto a μ , quindi ogni livello energetico è $2(2l+1)$ degenero.

Includo adesso nello studio il termine di deformazione. La simmetria centrale del problema è rotta dalla deformazione e quindi l'equazione di Schrödinger da risolvere è

$$h\psi_{nl\mu}(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{ws}(r) - \beta Y_{20} \right) \psi_{nl\mu}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{nl\mu} \psi_{nl\mu}(\mathbf{r}) \quad (3.37)$$

Il calcolo dell'hamiltoniana di campo medio in presenza di deformazione è stato presentato nella sottosezione 3.2.1 per l'oscillatore armonico, applicando al potenziale Woods-Saxon i risultati ottenuti in precedenza si ottiene la relazione (3.38) che definisce gli autovalori dell'hamiltoniana. Gli autovalori dell'hamiltoniana del potenziale tipo Woods-Saxon deformato sono:

$$\varepsilon_{nl\mu} = \varepsilon_{nl}^{ws} - \beta(-1)^\mu (2l+1) \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ -\mu & 0 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \quad (3.38)$$

dove ε_{nl}^{ws} indica il relativo autovalore del potenziale Woods-Saxon sferico.

Per le stesse considerazioni fatte nel caso dell'oscillatore armonico deformato, ogni livello energetico è 4 degenere.

Nella trattazione del modello a campo medio nei nuclei si inserisce anche un termine di interazione spin-orbita. Nel caso dei CM non ci sono evidenze sperimentali riguardanti la presenza di effetti riconducibili ad interazioni spin-orbita. Per questo motivo tale interazioni non sono state considerate nello studio.

Capitolo 4

Risultati

4.1 Introduzione

Il modello presentato nel capitolo precedente descrive i CM come sistemi formati da un fondo omogeneo con carica positiva che genera un potenziale medio nel quale sono confinati gli elettroni di valenza dei singoli atomi, considerati tra loro indipendenti. Lo stato fondamentale del sistema si ottiene allocando sui livelli energetici di singola particella gli elettroni di valenza, uno per ogni atomo del CM, nel rispetto del principio di Pauli.

Nello studio ho considerato due espressioni analitiche del campo medio: l'oscillatore armonico e il Woods-Saxon. In questo capitolo, presento i risultati ottenuti risolvendo l'equazione di Schrödinger per i due potenziali sia nella configurazione di simmetria sferica, sia in presenza di deformazione, ossia includendo nel potenziale il termine βY_{20} , presentato nella sezione 3.1.

L'obiettivo è quello di confrontare i risultati ottenuti dal modello con lo spettro di massa del Cluster di sodio presentato nella figura (1.1). Si ipotizza che i valori del numero di atomi corrispondenti al completo riempimento, chiusura, di un livello energetico implichino un aumento della stabilità del CM e che questo si traduca in un aumento della sua numerosità nello spettro di massa.

4.2 Dettagli Calcolo

I calcoli dell’analisi teorica dei CM sono svolti da un programma numerico scritto in linguaggio FORTRAN. Il programma calcola i livelli energetici di singola particella prodotti dal potenziale medio per entrambe le tipologie prese in esame, l’oscillatore armonico e il Woods-Saxon. Per ogni espressione del potenziale è poi calcolato lo spettro energetico considerando il termine di deformazione βY_{20} .

Per il potenziale di oscillatore armonico sferico gli autovalori sono ottenuti dalla relazione (3.17), per il Woods-Saxon non deformato i livelli energetici sono ottenuti risolvendo il sistema di equazioni lineari (3.36). Le incognite del sistema sono le a_k , ossia i coefficienti dello sviluppo delle autofunzioni dell’equazione di Schrödinger per il potenziale Woods-Saxon su base di oscillatore armonico. Il programma per ottenere i valori delle incognite a_k per ogni autostato $|nl\mu\rangle$ diagonalizza, con tecniche numeriche standard [Pre86], la matrice dei termini noti e calcola l’integrale radiale presente nel sistema con la tecnica d’integrazione numerica di Simpson. Sono così calcolati gli autovalori ε_{nl}^{ws} .

I risultati ottenuti hanno una stabilità numerica stimata sulla quarta cifra significativa. Questa stima è stata fatta variando il numero dei punti della griglia di integrazione numerica, il raggio di integrazione e il numero dei coefficienti dello sviluppo della autofunzioni di Woods-Saxon sulla base di oscillatore armonico.

Successivamente vengono calcolati i livelli energetici prodotti da entrambe le espressioni del campo medio in presenza della deformazione. Gli autovalori del potenziale tipo oscillatore armonico e tipo Woods-Saxon sono ottenuti rispettivamente dalla relazione (3.29) e (3.38).

I livelli energetici sono presentati in ordine di energia crescente, scegliendo come riferimento quello di minima energia, e in corrispondenza di ognuno è calcolato il numero di atomi che formano il CM. Questo è realizzato allocando sui livelli energetici gli elettroni di valenza del CM, uno per ogni atomo da cui è formato. Gli elettroni sono disposti considerando la degenerazione di ogni livello, nel rispetto del principio di Pauli.

Per poter confrontare i risultati ottenuti dal modello teorico con lo spettro di massa sperimentale valuto la stabilità del CM al variare del numero N di atomi che lo compongono. Si deve considerare come varia la sua energia di legame in funzione di N . Il modello utilizzato in

questa tesi non permette di calcolare le energie di legame del CM. La quantità che considero nel mio studio è la variazione dell'energia totale del CM quando si aggiunge, o toglie, un atomo al CM composto da N atomi [Cle05]

$$\Delta_2(N) = \frac{3}{4} \{ [\varepsilon(N+1) - \varepsilon(N)] - [\varepsilon(N) - \varepsilon(N-1)] \} \quad (4.1)$$

dove $\varepsilon(N)$ indica l'energia dell'ultimo livello occupato del CM formato da N atomi.

4.3 Risultati

In questa sezione presento i risultati prodotti dal programma, frutto del modello teorico con il quale sono stati descritti i CM.

La frequenza ω_0 dell'oscillatore armonico viene stimata empiricamente dal numero N di atomi da cui è formato il CM, attraverso la relazione ([Rin80], pag. 41)

$$\hbar\omega_0 \approx \frac{5}{4} \left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} \frac{\hbar^2}{mr_0^2} N^{1/3} , \quad (4.2)$$

dove m indica la massa dell'elettrone e con r_0 ho indicato il raggio atomico medio. Da quest'ultimo si ricava il valore del raggio medio del CM formato da N atomi

$$R_0 = r_0 N^{1/3} . \quad (4.3)$$

Si osservi che le costanti ω_0 e R_0 dipendono dal numero N di atomi del Cluster, pertanto nel programma, i loro valori, dovrebbero essere diversi per ogni CM al variare del numero di atomi. Tuttavia trascuriamo questo aspetto fissando un unico valore per queste costanti.

I dati d'ingresso del problema fisico per le due espressioni del campo medio sono riportati nella seguente tabella

	Oscillatore Armonico	Woods-Saxon
r_0 (Å)	2.25	2.25
V_0 (eV)	/	-6.00
a_0 (Å)	/	1.20

Tabella 4.1: Dati d'ingresso del problema fisico per i due potenziali, tipo oscillatore armonico e Woods-Saxon. r_0 il raggio atomico medio e a_0 e V_0 rappresentano rispettivamente l'ampiezza e la profondità del potenziale tipo Woods-Saxon.

Il valore di r_0 è stato preso da [Nis02] e corrisponde al valore calcolato sperimentalmente per il CM del sodio.

I valori dei parametri a_0 e V_0 sono stati scelti affinché la differenza tra i livelli energetici $1p$ e $1s$ prodotti dal potenziale Woods-Saxon riproducesse il valore di 0.4806, che rappresenta la differenza di energia tra gli stessi livelli prodotti dall'oscillatore armonico. Come si può vedere dalla tabella 4.2 il risultato ottenuto, con i valori dei parametri presentati nella tabella 4.1, è 0.4818, questo presenta rispetto al valore aspettato un errore relativo minore dell' 1%.

Nella figura 4.1 confronto l'andamento dei due potenziali in funzione della distanza dal centro del CM.

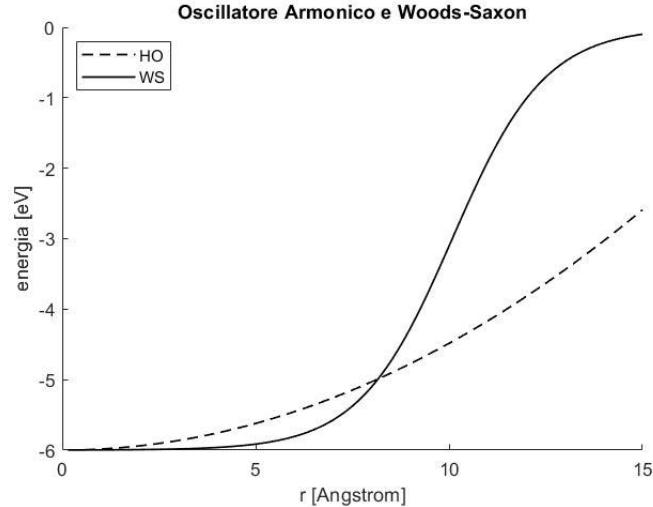


Figura 4.1: Confronto tra i due potenziali usati nel calcolo in funzione della distanza dal centro del CM. Linea continua, potenziale di Woods-Saxon, linea tratteggiata, potenziale oscillatore armonico.

4.3.1 Caso Sferico

Presento, nella tabella 4.2, le energie di singola particella prodotte da entrambi i potenziali sferici in cui il livello $1s$, cioè il livello $n, l = 0, 1$, è preso come riferimento.

In corrispondenza di ogni livello energetico è riportato il numero N di atomi da cui è formato il CM.

			HO	WS
n	l	N Atomi	Energia(eV)	Energia(eV)
1	0	2	0.0000	0.0000
1	1	8	0.4806	0.4818
1	2	18	0.9612	1.0457
2	0	20	0.9612	1.2121
1	3	34	1.4418	1.6795
2	1	40	1.4418	1.9226
1	4	58	1.9224	2.3735
2	2	68	1.9224	2.6701
3	0	70	1.9224	2.7830
1	5	90	2.4030	3.1192

Tabella 4.2: Livelli energetici prodotti dai potenziali sferici di oscillatore armonico e Woods-Saxon. Per ogni livello sono riportati i numeri quantici n, l che lo identificano e il numero N di atomi che formano il CM.

Nella figura 4.2 confronto gli spettri energetici prodotti dai due potenziali, l'oscillatore armonico e il Woods-Saxon.

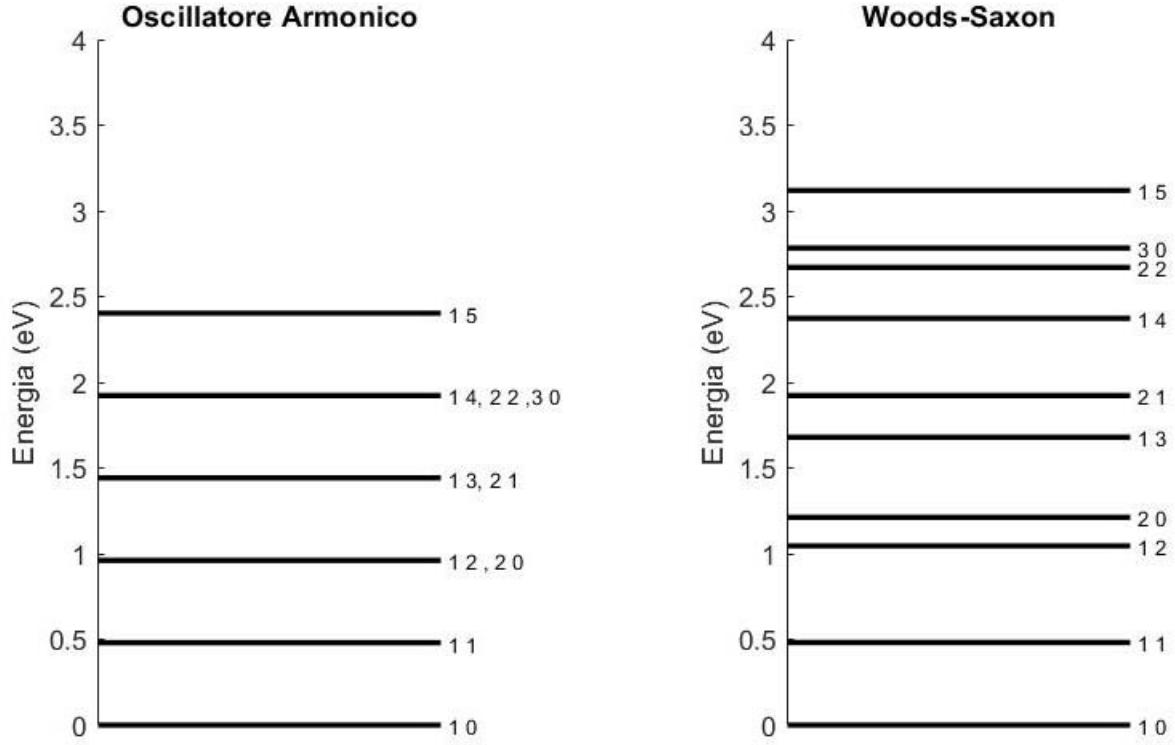


Figura 4.2: Spettro energetico prodotto dal potenziale di oscillatore armonico e dal potenziale Woods-Saxon. A destra di ogni livello energetico, identificato dalla linea nera spessa, sono riportati i numeri quantici n, l che lo descrivono

Lo spettro energetico del potenziale di oscillatore armonico presenta una differenza di energia costante tra un livello e il precedente, differentemente dallo spettro prodotto dal Woods-Saxon, e rispetto a quest'ultimo prevede una differenza di energia minore tra l'ultimo livello occupato dal sistema e il livello $1s$ preso come riferimento. In gergo, questo effetto viene identificato affermando che lo spettro dell'oscillatore armonico è più compresso di quello del Woods-Saxon.

Per i due potenziali calcolo la *Second Difference* degli stati presentati nella tabella 4.2 , in funzione del numero N di atomi da cui il CM è composto. I risultati sono mostrati nei grafici 4.3 e 4.4

N atomi	Δ_2 (eV)
2	0.4806
8	0.4806
20	0.4806
40	0.4806
70	0.4806

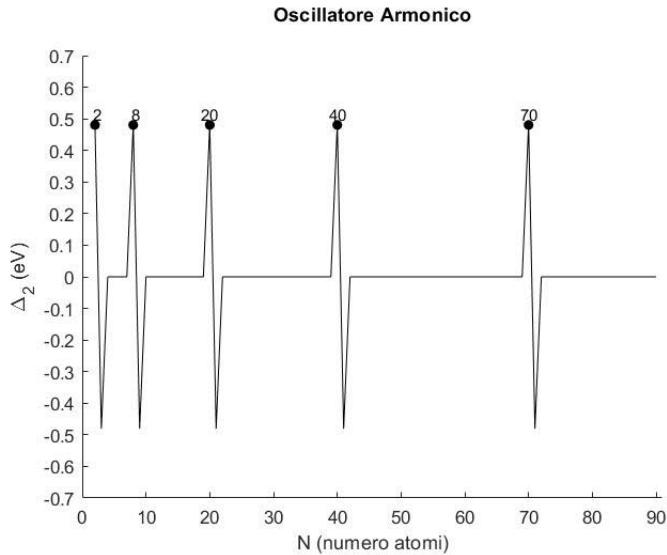


Tabella 4.3: Grafico di Δ_2 in funzione del numero N di atomi del CM, per il potenziale di Oscillatore armonico sferico. I picchi sono identificati da un punto e i punti neri indicano i picchi maggiori, le coordinate di questi ultimi sono riportati nella tabella a lato.

N atomi	Δ_2 (eV)
2	0.4818
8	0.5639
18	0.1663
20	0.4674
34	0.2431
40	0.4509
58	0.2966
68	0.1129
70	0.3362
90	0.4741

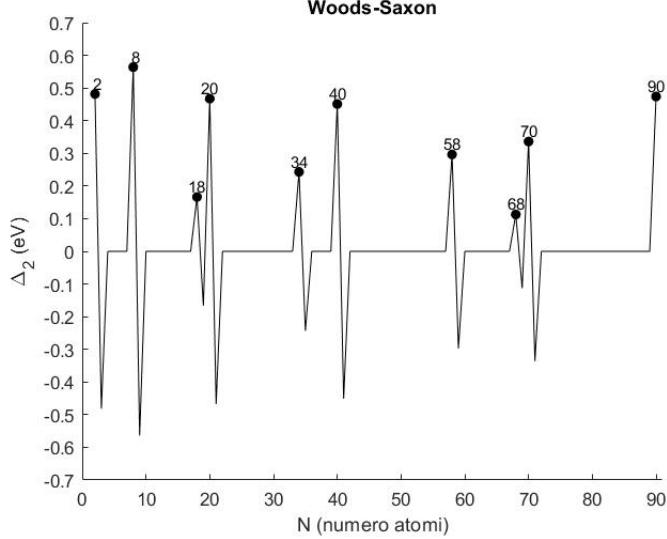


Tabella 4.4: Grafico di Δ_2 in funzione del numero N di atomi del CM, per il potenziale Woods-Saxon non deformato. I picchi sono identificati da un punto e i punti neri indicano i picchi maggiori, le coordinate di questi ultimi sono riportati nella tabella a lato.

Riporto lo spettro di massa sperimentale del Cluster di sodio, figura 4.3 che rappresenta il riferimento per il confronto dei risultati ottenuti dal modello teorico.

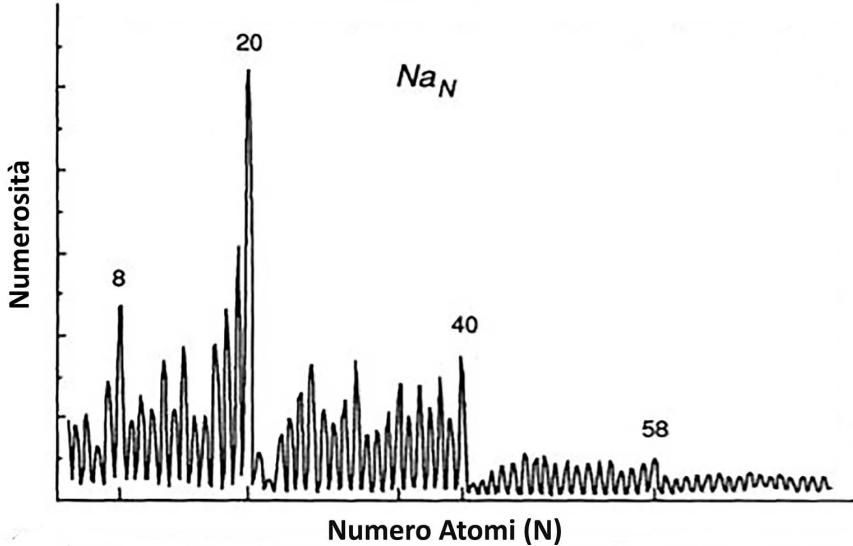


Figura 4.3: Spettro di massa sperimentale del Cluster di sodio [Hee93].

Confronto il grafico 4.3 con lo spettro di massa sperimentale, figura 4.3. Si evince come il potenziale di oscillatore armonico è in grado di riprodurre i picchi in corrispondenza di $N = 2, 8, 20, 40$. Si noti che nello spettro di massa 4.3 i picchi in corrispondenza dei numeri $2, 8, 20, 40, 58$ presentano una diversa intensità, e neanche questo aspetto è riprodotto dall'oscillatore armonico, infatti nella figura 4.3 l'intensità dei picchi è costante.

Il potenziale di tipo Woods-Saxon risulta più accurato sia perché è in grado di riprodurre l'aspetto appena citato sia perché riesce a predire un maggior numero di picchi, in particolare quello presente, nei dati sperimentali, per $N = 58$.

4.3.2 Caso Deformato

Nel calcolo dei livelli energetici di singola particella prodotti dalle due tipologie di potenziale in presenza della deformazione, il parametro di deformazione β , che ha dimensioni di eV, è fatto variare nel range di valori $[-1, 1]$ con un numero finito di passi.

I risultati ottenuti sono mostrati nei diagrammi (4.4),(4.5), dai quali si osserva come ogni livello energetico di singola particella varia in funzione di β . Il valore di β selezionato per ogni CM è quello che minimizza l'energia dell'ultimo livello di singola particella occupato dal Cluster.

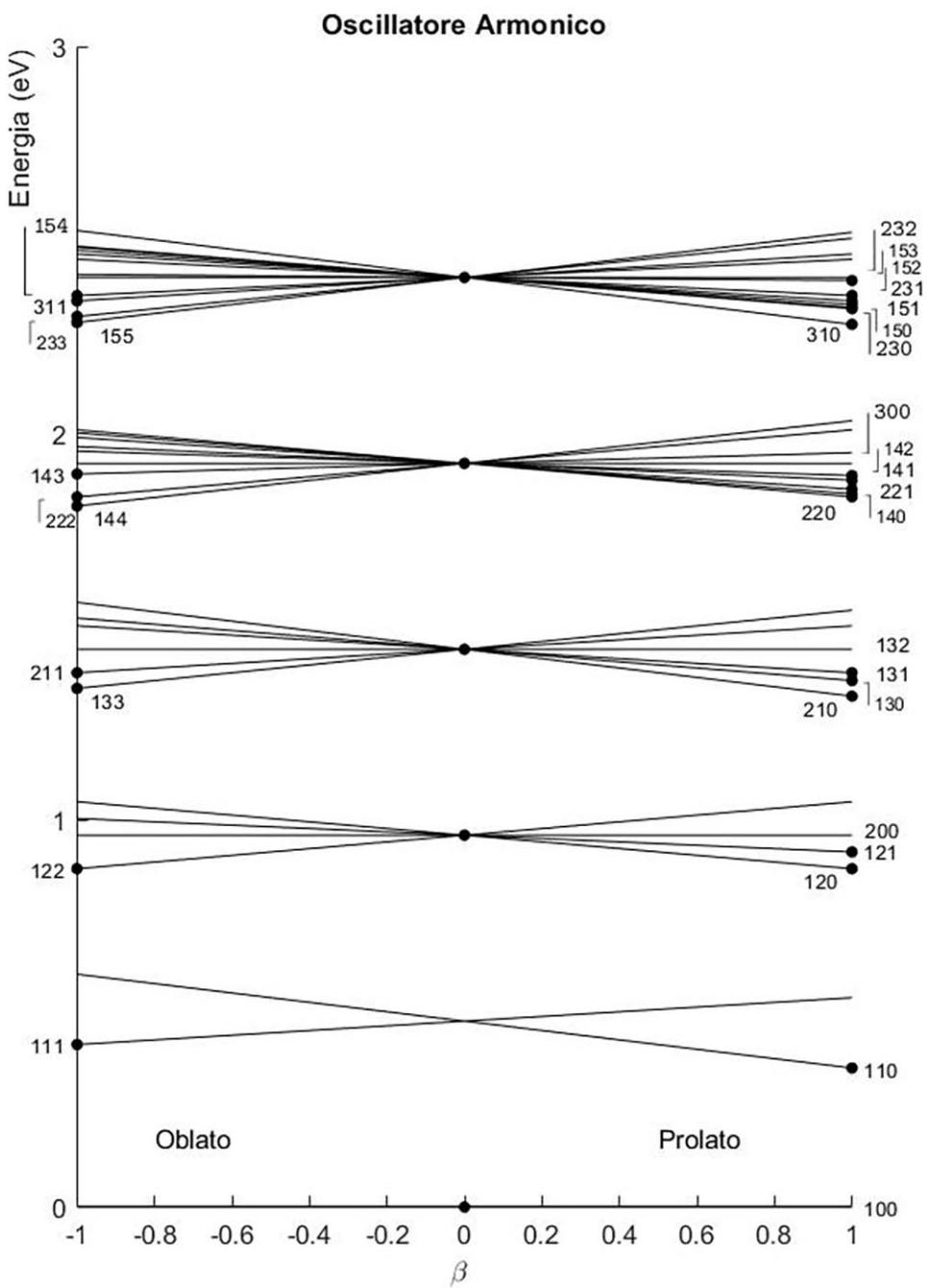


Figura 4.4: Variazione livelli energetici di singola particella in funzione di β , espresso in eV. Le linee rappresentano i singoli livelli energetici, che variano al variare del parametro di deformazione β . I numeri in corrispondenza di ogni linea rappresentano i numeri quantici del livello energetico. I punti rappresentano per ogni Cluster il maggior livello di energia occupato e la corrispondente deformazione. La deformazione del potenziale è causata da una deformazione della forma CM: oblata per i valori negativi, e prolata per i valori positivi di β

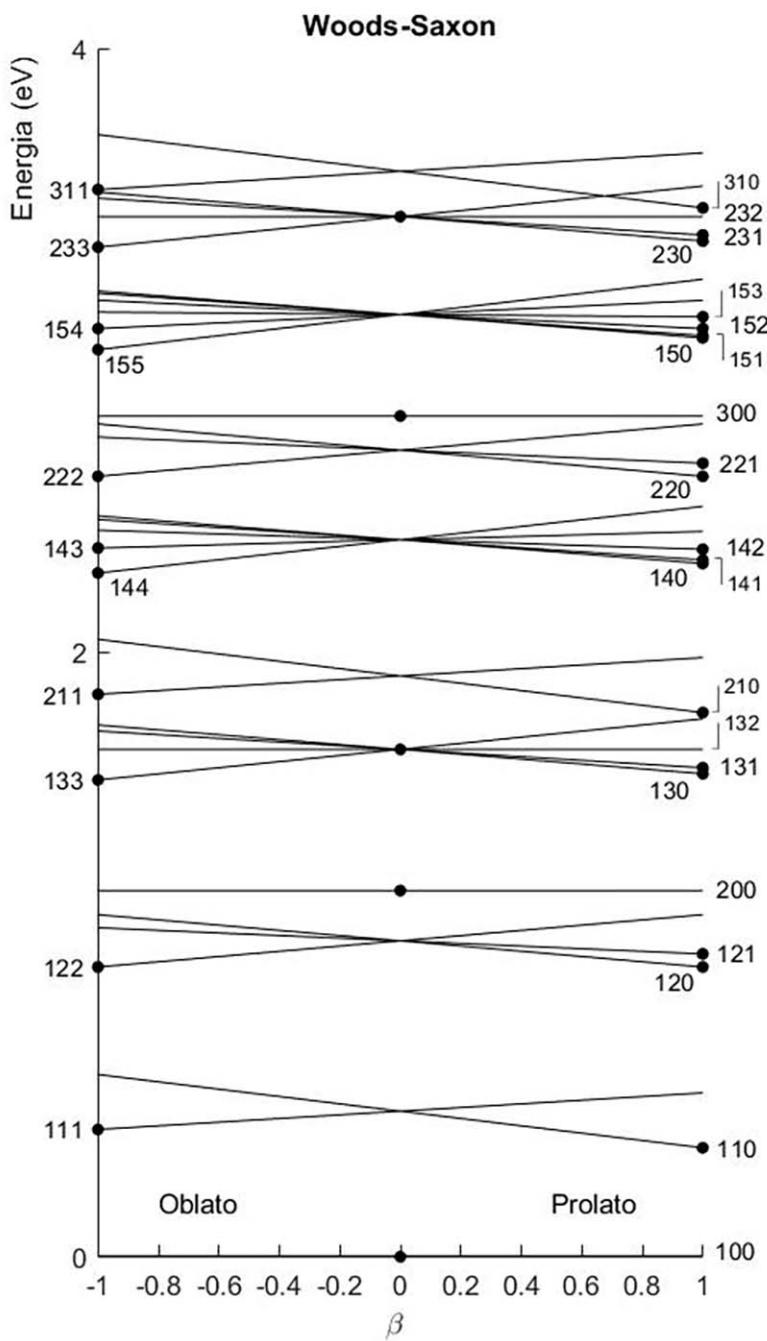


Figura 4.5: Variazione livelli energetici di singola particella in funzione di β , espresso in eV. Le linee rappresentano i singoli livelli energetici, che variano al variare del parametro di deformazione β . I numeri in corrispondenza di ogni linea rappresentano i numeri quantici del livello energetico. I punti rappresentano per ogni Cluster il maggior livello di energia occupato e la corrispondente deformazione. La deformazione del potenziale è causata da una deformazione della forma CM: oblata per i valori negativi, e prolata per i valori positivi di β

Le tabelle 4.5 presentano i livelli energetici di singola particella prodotti dai due potenziali

considerati, in presenza di deformazione

n	l	m	N Atomi	Energia(eV)
1	0	0	2	0.0000
1	1	0	4	0.3594
1	1	1	8	0.4200
1	2	0	10	0.8746
1	2	2	14	0.8746
1	2	1	18	0.9179
2	0	0	20	0.9612
2	1	0	22	1.3205
1	3	3	26	1.3408
1	3	0	28	1.3610
2	1	1	32	1.3812
1	3	1	36	1.3812
1	3	2	40	1.4418
1	4	4	44	1.8122
2	2	0	46	1.8358
2	2	2	50	1.8358
1	4	0	52	1.8437
1	4	1	56	1.8555
2	2	1	60	1.8791
1	4	2	64	1.8910
1	4	3	68	1.8949
3	0	0	70	1.9224
3	1	0	72	2.2817
1	5	5	76	2.2865
2	3	3	80	2.3020
2	3	0	82	2.3222
1	5	0	84	2.3253
1	5	1	88	2.3331
3	1	1	90	2.3424

(a) Oscillatore Armonico deformato

n	l	m	N Atomi	Energia(eV)
1	0	0	2	0.0000
1	1	0	4	0.3606
1	1	1	8	0.4213
1	2	0	10	0.9591
1	2	2	14	0.9593
1	2	1	18	1.0025
2	0	0	20	1.2121
1	3	3	24	1.5787
1	3	0	26	1.5986
1	3	1	30	1.6189
1	3	2	34	1.6797
2	1	0	36	1.8013
2	1	1	40	1.8621
1	4	4	44	2.2637
1	4	0	46	2.2948
1	4	1	50	2.3067
1	4	2	54	2.3422
1	4	3	58	2.3463
2	2	0	60	2.5835
2	2	2	64	2.5837
2	2	1	68	2.6269
3	0	0	70	2.7830
1	5	5	74	3.0031
1	5	0	76	3.0415
1	5	1	80	3.0494
1	5	2	84	3.0728
1	5	4	88	3.0730
1	5	3	90	3.1118

(b) Woods-Saxon deformato

Tabella 4.5: Livelli energetici prodotti dal potenziale di Oscillatore Armonico e dal Woods-Saxon in presenza della deformazione. Per ogni livello è riportato l'insieme di numeri quantici dai quali è definito, e il numero N di atomi che formano il CM.

Dallo spettro energetico presentato nelle tabelle 4.5 calcolo, per ogni stato, la *Second Difference* del CM al variare del numero N di atomi per le due espressione del campo medio.

Mostro prima i risultati del potenziale di oscillatore armonico deformato che vengono confrontati con i risultati ottenuti dallo stesso potenziale nella configurazione sferica. Successivamente svolgo lo stesso confronto per il potenziale di tipo Woods-Saxon.

Come in precedenza, anche in questo caso il termine ultimo del confronto è lo spettro di massa sperimentale del Cluster di sodio, figura 4.3

Il grafico 4.6 è relativo al potenziale di oscillatore armonico in presenza di deformazione, questo viene confrontato con il grafico, 4.3, dello stesso potenziale nella configurazione sferica.

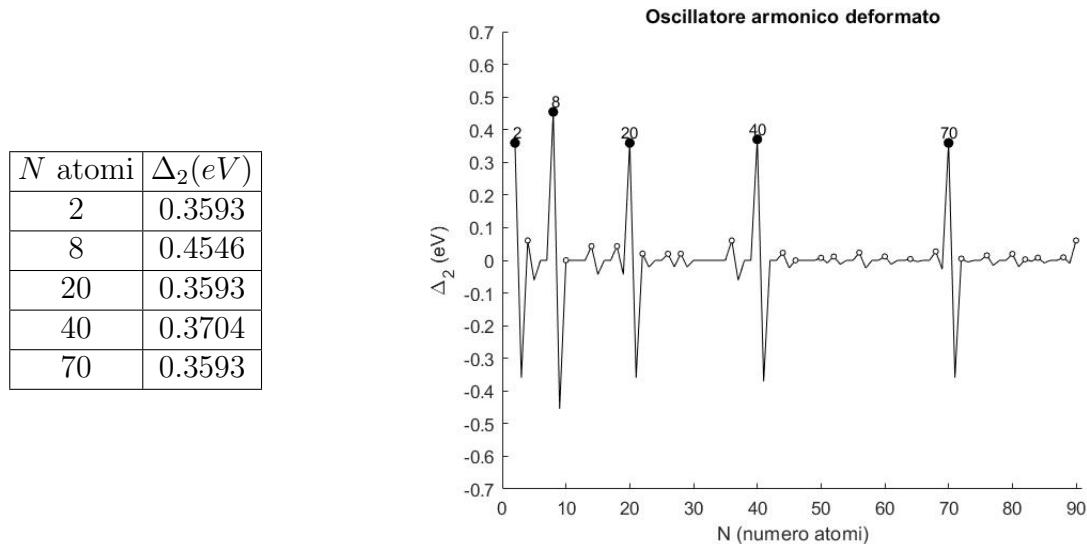


Tabella 4.6: Grafico di Δ_2 in funzione del numero N di atomi del CM, per il potenziale di Oscillatore armonico deformato.

Potenziale di Woods-Saxon. La prima figura mostra la configurazione a simmetria sferica, la seconda la presenza della deformazione.

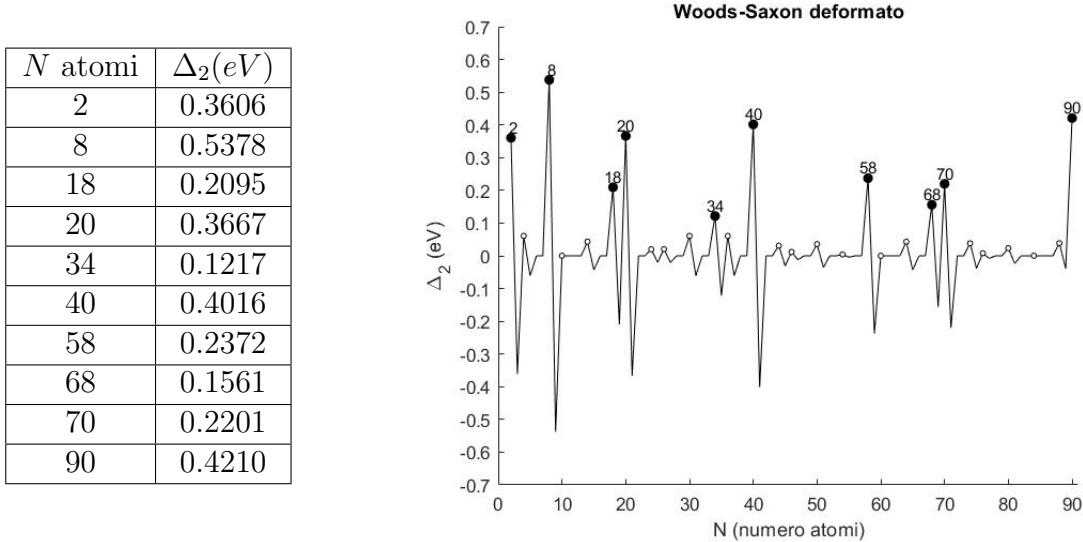


Tabella 4.7: Grafico di Δ_2 in funzione del numero N di atomi del CM, per il potenziale di Woods-Saxon deformato.

Si verifica una situazione analoga quando si mette a confronto il caso di configurazione sferica con quello deformato, ossia quando si confrontano tra di loro i grafici 4.3, 4.6 per l'oscillatore armonico e i grafici 4.4, 4.7 per il Woods-Saxon. Da ciò si evince che includendo nel campo medio il termine di deformazione, indipendentemente dalla tipologia di potenziale scelto, si ottengono risultati in grado di riprodurre, nel relativo grafico di $\Delta_2(N)$, i picchi minori della numerosità presenti nello spettro di massa sperimentale 4.3 in corrispondenza dei valori di N che non rappresentano la saturazione di una shell di energia. Inoltre si nota che la presenza della deformazione rimodula l'intensità dei picchi di numerosità previsti dal modello teorico. Questa rimodulazione, per $N \geq 40$ permette di ottenere risultati che meglio si adattano a quelli sperimentali.

Le differenze e le analogie tra le due tipologie di campo medio analizzate rimangono invariate passando dal caso sferico a quello deformato e quindi rimangono valide le considerazioni presentate alla fine del paragrafo 4.3.1.

Capitolo 5

Conclusioni

Nella presente tesi i CM sono stati descritti dal modello *Jellium* che approssima il loro nocciolo ionico con una distribuzione di carica uniforme positiva. Sfruttando il modello a campo medio gli elettroni, confinati nel potenziale generato dal background di carica, sono considerati tra loro indipendenti. Questo permette di ottenere lo spettro energetico del Cluster dagli autovalori dell'hamiltoniana di singola particella.

Dai livelli energetici prodotti dal campo medio, del quale sono state analizzate due diverse espressioni, sfruttando la *Second Difference* è stata ottenuta una stima sulla stabilità dei CM in funzione del numero N di atomi che lo compongono.

Oltre alla configurazione a simmetria sferica del CM è stato preso in esame il caso di Cluster deformato, includendo un termine di deformazione nel potenziale del sistema.

L'analisi dei risultati ottenuti dalle due diverse espressioni del campo medio nella configurazione sferica ha messo in evidenza che entrambi i potenziali sono in grado di prevedere i principali picchi di numerosità presenti nello spettro di massa del Cluster di sodio in corrispondenza dei numeri 8, 20, 40. Il potenziale Woods-Saxon fornisce risultati più precisi rispetto all'oscillatore armonico sia perché è in grado di prevedere un maggior numero di valori di N , per i quali i CM risultano possedere un'elevata stabilità, sia perché è in grado di riprodurre la diversa intensità di questi picchi di numerosità. L'ipotesi sottesa all'analisi svolta è che una variazione in Δ_2 corrisponda ad una variazione della numerosità della formazione dei CM.

Il confronto del campo medio nella configurazione a simmetria sferica con quello deformato ha permesso di concludere che, indipendentemente dalla tipologia del potenziale, la presenza

del termine di deformazione consente di prevedere anche i picchi di numerosità minori ottenuti nello spettro di massa sperimentale 4.3 per valori di N diversi dai numeri magici.

Si deduce quindi che è verificata l'ipotesi secondo la quale la maggior numerosità, riscontrabile nello spettro di massa del Cluster di sodio, si ottiene per valori del numero N di atomi dei CM corrispondenti alla saturazione di un livello di energia di singola particella.

È evidente però che il modello teorico adottato nella presente tesi può solo riprodurre i principali aspetti fenomenologici dei CM, ad esempio non è in grado di calcolare l'energia di legame del Cluster. Per questo motivo, per ottenere delle previsioni sulla stabilità dei CM dai risultati prodotti dal modello, le differenze di energie di legame dei Cluster, al variare del numero N di atomi da cui sono formati, sono state approssimate dalle differenze di energia dell'ultimo livello occupato dal sistema in funzione di N .

Per avere una descrizione dettagliata dei sistemi di Cluster è necessario utilizzare teorie che considerano individualmente ogni atomo e quindi l'interazione atomo-atomo.

Bibliografia

- [Bra93] M. Brack, *The physics of simple metal clusters: self-consistent jellium model and semiclassical approaches*, Reviews of Modern Physics, 65 (1993), 677-732.
- [Cle05] K. Clemenger, *Ellipsoidal shell structure in free-electron metal clusters*, Physical Review B 32 (1985), 1359-1362.
- [Coh91] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Wiley-VCH (1991).
- [Hee93] W.A. De Heer, *The physics of simple metal clusters: experimental aspects and simple models*, Reviews of Modern Physics, 65 (1993), 611-676.
- [Jah37] H.A. Jahn, E. Teller, *Stability of Polyatomic Molecules in Degenerate Electronic States. I. Orbital Degeneracy*, The Royal Society, 161 (1937), 220-235.
- [Nil01] S.G. Nilsson, *Binding states of individual nucleons in strongly deformed nuclei*, Kong.Dan.Mat.Fys.Med., 29 (1955), 1-69.
- [Nis02] H.Nishioka, K. Hansen, B.R. Mottelson, *Supershells in metal clusters*, Physical Review B 42 (1990), 9377-9386.
- [Pre86] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The art of scientific computing*, Cambridge University Press, Cambridge (1986).
- [Rei04] P.G. Reinhard, E.Suraud, *Introduction to Cluster Dynamics*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim (2004).
- [Rin80] P.Ring, P.Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer-Verlag, Berlino, (1980).