UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI LECCE
FACOLTÀ DI SCIENZE MM. FF. NN.
CORSO DI LAUREA IN FISICA

Calcoli Hartree-Fock per nuclei doppio magici

Relatore:
Ch.mo Prof. Giampaolo Co'

Candidato:
Stefano Pagliara

Anno Accademico 2003-2004

Indice

1 Introduzione

Un sistema di molti corpi che interagiscono con forze a due corpi, può essere descritto da un'hamiltoniana della forma:

$$H = \sum_i t_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j} V_{ij} \tag{1}$$

dove il primo termine rappresenta l'energia cinetica ed è un operatore a un corpo, mentre il secondo termine rappresenta l'interazione che è un operatore a due corpi.

Gli indici i e j identificano la singola particella che forma il sistema, ad esempio un nucleone nel caso di un nucleo atomico e le somme sono estese su tutti i nucleoni.

Una soluzione esatta, cioè senza alcuna approssimazione, dell'equazione di Schrödinger utilizzando l'hamiltoniana (1), è estremamente complicata dal punto di vista tecnico.

Al momento, per quanto riguarda la fisica nucleare, si è riusciti a risolvere questa equazione solo per nuclei con un numero di nucleoni A $\leq$ 10 [Pie02] utilizzando onerose tecniche numeriche.

Ad oggi l'equazione di Schrödinger di un sistema a molti corpi è stata risolta utilizzando approssimazioni. La più semplice e base di tutte le trattazioni più complesse è l'approssimazione o modello di campo medio.

All'hamiltoniana (1) aggiungiamo e togliamo un termine di potenziale medio U_i al quale è soggetto il singolo nucleone indipendentemente dalla presenza degli altri nucleoni.

Scriviamo l'hamiltoniana come:

$$\begin{aligned} H &= \sum_i t_i + \sum_i U_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j} V_{ij} - \sum_i U_i = \\ &= \sum_i [t_i + U_i] + V_{res} = H_0 + V_{res}. \end{aligned} \tag{2}$$

Nella precedente espressione V_{res}, detta l'interazione residua, contiene la parte a due corpi dell'hamiltoniana H; H_0 è la somma delle hamiltoniane dei singoli nucleoni ed è un operatore ad un corpo:

$$H_0 = \sum_i h_i = \sum_i [t_i + U_i]. \tag{3}$$

L'ipotesi del modello a particelle indipendenti, o a campo medio, consiste nel trascurare V_{res} e descrivere il sistema usando solo H_0.

Gli autostati di H_0 sono dati dal prodotto degli autostati $|\phi_i\rangle$ delle hamiltoniane h_i del singolo nucleone o da loro combinazioni lineari. Se il sistema è formato da fermioni, come nel caso dei nuclei atomici, è necessario considerare il principio di esclusione di Pauli.

Quindi un autostato di H_0 può essere descritto come determinante di Slater di autostati di singola particella:

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}} \, det||\phi_i\rangle|. \tag{4}$$

In questa semplice trattazione il campo medio U_i è imposto dall'esterno.

È possibile partire da un'interazione fra particelle e mostrare che, imponendo che gli autostati del sistema siano determinanti di Slater, si limita l'hamiltoniana (1) al solo termine ad un corpo (3). [Row70]

Questo è ciò che avviene nella teoria Hartree-Fock.

In questo lavoro mostreremo come ottenere le equazioni Hartree-Fock utilizzando il metodo variazionale di Rietz. In seguito mostreremo come queste equazioni possano essere semplificate quando il sistema gode di simmetria sferica. Utilizzando diversi codici numerici risolveremo le equazioni Hartree-Fock per alcuni nuclei doppio-magici e confronteremo le energie di legame, i raggi, le distribuzioni di carica e gli spettri energetici di singola particella ottenuti, con i valori sperimentali.

2 Le equazioni Hartree-Fock

La funzione d'onda che descrive un nucleo composto da A nucleoni, è un vettore dello spazio di Hilbert a molticorpi del tipo $\Psi(x_1, x_2, ..., x_A)$ dove il generico x_i indica i numeri quantici che caratterizzano l'i-esimo nucleone. Nel caso in esame l'equazione di Schrödinger:

$$H|\Psi\rangle \;=\; E|\Psi\rangle \tag{5}$$

è equivalente alla seguente equazione variazionale:

$$\delta E[\Psi] \;=\; \delta\frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \;=\; 0. \tag{6}$$

dove il simbolo δ indica la variazione del funzionale. Per provare quanto affermato consideriamo:

$$E\langle\Psi|\Psi\rangle \;=\; \langle\Psi|H|\Psi\rangle \tag{7}$$

e facciamo operare la variazione al primo e al secondo membro:

$$\delta E\langle\Psi|\Psi\rangle + E\delta\langle\Psi|\Psi\rangle \;=\; \delta(\langle\Psi|H|\Psi\rangle). \tag{8}$$

Ricaviamo così:

$$\delta E \;=\; \frac{1}{\langle\Psi|\Psi\rangle}\delta(\langle\Psi|H-E|\rangle\Psi). \tag{9}$$

Quindi $\delta E \;=\; 0$ è equivalente a:

$$\delta(\langle\Psi|H-E|\Psi\rangle) = 0. \tag{10}$$

Dato che δ opera sia su $|\Psi\rangle$ che su $\langle\Psi|$ possiamo riscrivere l'equazione come:

$$\langle\delta\Psi|[H-E]|\Psi\rangle + \langle\Psi|[H-E]|\delta\Psi\rangle = 0. \tag{11}$$

Ora $|\delta\Psi\rangle$ e $\langle\delta\Psi|$ non sono indipendenti, ma possono essere considerati tali, perchè le variazioni sono arbitrarie e si può variare indipendentemente la parte reale e la parte immaginaria del vettore $|\Psi\rangle$. Questo implica che affinchè l'equazione precedente sia verificata ognuno dei due membri deve annullarsi:

$$\langle\delta\Psi|[H-E]|\Psi\rangle = 0 \tag{12}$$

e

$$\langle\Psi|[H-E]|\delta\Psi\rangle = 0. \tag{13}$$

Dato che il vettore $|\Psi\rangle$ e la variazione δ sono arbitrarie deve essere verificata l'equazione:

$$[H - E]|\Psi\rangle = 0 \tag{14}$$

che è l'equazione di Schrödinger come volevamo dimostrare.

Il principio variazionale viene utilizzato per cercare minimi in sottospazi di Hilbert legati a certe espressioni funzionali di $|\Psi\rangle$.

La dimostrazione di equivalenza fra principio variazionale ed equazione di Schrödinger non pone alcun limite nella ricerca del minimo.

Nel caso Hartree-Fock tale limite è imposto dall'ipotesi che $|\Psi\rangle$ sia un determinante di Slater di autostati di singolo nucleone. Questo, inoltre, automaticamente implica che l'hamiltoniana a molticorpi dell'equazione (2) sia somma di hamiltoniane a un corpo e quindi V_{res} sia trascurata.

Restringendo la ricerca del minimo ad un sottospazio dello spazio di Hilbert si ottiene un minimo di energia superiore a quello esatto. Consideriamo la funzione di prova sviluppata in termini delle funzioni d'onda esatte:

$$|\Phi\rangle \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} D_n \;|\Psi_n\rangle \tag{15}$$

dove D_n sono coefficienti e $|\Psi_n\rangle$ è soluzione dell' equazione di Schrödinger:

$$H|\Psi_n\rangle \;=\; E_n|\Psi_n\rangle \tag{16}$$

e rappresenta l'n-esimo stato eccitato del nucleo. Il valore dell'energia corrispondente allo stato $|\Phi\rangle$ può essere espresso nel seguente modo:

$$\begin{aligned} E[\Phi] \;&=\; \frac{\langle\Phi|H|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle} \;=\; \frac{\sum_{n,n'}\;\langle\Psi_n|D_n^* H D_{n'}|\Psi_{n'}\rangle}{\sum_{n,n'}\;\langle\Psi_n|D_n^* D_{n'}|\Psi_{n'}\rangle} \;= \\ =\;& \frac{\sum_{n,n'}\;\; D_n^* D_{n'}\langle\Psi_n|H|\Psi_{n'}\rangle}{\sum_{n,n'}\;\; D_n^* D_{n'}\langle\Psi_n|\Psi_{n'}\rangle} \;=\; \frac{\sum_{n,n'}\;\; D_n^* D_{n'} E_{n'}\delta_{nn'}}{\sum_n |D_n|^2} \end{aligned} \tag{17}$$

Dato che E_0 è l'energia dello stato fondamentale, $E_n > E_0$ per ogni $n > 0$. Otteniamo quindi:

$$E[\Phi] \geq \frac{\sum_{n=0}^{\infty} |D_n|^2 E_0}{\sum_{n=0}^{\infty} |D_n|^2} \;=\; E_0 \tag{18}$$

come volevamo dimostrare.

Utilizziamo il principio variazionale di Rietz per ricavare le equazioni Hartree-Fock.

Consideriamo la funzione d'onda approssimata $|\Phi\rangle$, costruita come determinante di Slater di arbitrari stati di singola particella $|i\rangle$, $|j\rangle$, $|k\rangle$,...che formano una base ortonormale.

Costruiamo il funzionale $E[\Phi]$ e richiediamo che sia stazionario rispetto alla variazione degli A vettori corrispondenti alle singole particelle.

L'ortonormalizzazione delle funzioni d'onda delle singole particelle impone A^2 condizioni:

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \tag{19}$$

dove $i, j = 1, ..., A$.

Tenendo conto di tali condizioni, utilizzando il metodo dei moltiplicatori di Lagrange, otteniamo la seguente equazione variazionale:

$$\delta[E(\Phi) - \sum_{i,j} \lambda_{ij}\langle i|j\rangle] = 0 \tag{20}$$

dove λ_{ij} sono i moltiplicatori di Lagrange. Possiamo scrivere allora:

$$\delta\langle\Phi|H|\Phi\rangle - \sum_{i,j} \lambda_{ij}\delta\langle i|j\rangle = 0 \tag{21}$$

dove consideriamo un'hamiltoniana del tipo:

$$H = \sum_i t_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j} V_{ij}. \tag{22}$$

Con tale hamiltoniana l'equazione (21) diventa:

$$\sum_i \delta\ \langle i|t|i\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i,j}[\delta\langle ij|V|ij\rangle - \delta\langle ij|V|ji\rangle] - \sum_{i,j} \lambda_{ij}\delta\langle i|j\rangle = 0. \tag{23}$$

La variazione sui due stati è data da:

$$\delta\langle ij| = \langle(\delta i)j| + \langle i\delta(j)|. \tag{24}$$

Essendo i e j indici arbitrari in una somma, globalmente le variazioni sull'indice i o j danno lo stesso risultato. Pertanto otteniamo:

$$\sum_{i,j} \delta\langle ij| = \sum_{i,j}[\langle\delta ij| + \langle i\delta j|] = 2\sum_{i,j}\langle\delta ij| \tag{25}$$

e quindi:

$$\sum_i\langle\delta i|t|i\rangle + \sum_{i,j}[\langle\delta ij|V|ij\rangle - \langle\delta ij|V|ji\rangle] - \sum_{i,j} \lambda_{ij}\langle\delta i|j\rangle = 0. \tag{26}$$

Le variazioni dei vettori delle singole particelle sono arbitrarie. Questo significa che l'equazione (26) è somma nulla di termini indipendenti; ciò implica che ogni termine è nullo.

Formalmente possiamo utilizzare questo risultato considerando che solo la variazione della k-esima particella sia non nulla.

Con tale convenzione possiamo riscrivere l'equazione (26) come:

$$\langle \delta k|t|k\rangle + \sum_j [\langle \delta k|\langle j|V|j\rangle|k\rangle - \langle \delta k|\langle j|V|k\rangle|j\rangle] = \sum_j \lambda_{kj}\langle \delta k|j\rangle. \tag{27}$$

In tale modo, sfruttando il fatto che le variazioni sono indipendenti, abbiamo scomposto il problema ad A variazioni in A problemi ad una variazione.

Dato che $|\delta k\rangle$ è non nullo si può dividere per $|\delta k\rangle$ e si ottiene:

$$t|k\rangle + \sum_j [\langle j|V|j\rangle|k\rangle - \langle j|V|k\rangle|j\rangle] = \sum_j \lambda_{kj}|j\rangle. \tag{28}$$

Supponiamo che esista un'hamiltoniana di singola particella tale che:

$$\lambda_{kj} = \langle k|h|j\rangle. \tag{29}$$

Possiamo trovare una trasformazione unitaria S che permette un cambiamento di base:

$$|\tilde{k}\rangle = \sum_{k,k'} S_{kk'}|k\rangle \tag{30}$$

con S tale che:

$$\sum_{k,k'} S^{+}_{kk'} S_{kk'} = 1. \tag{31}$$

Con tale cambiamento di base l'hamiltoniana della singola particella è diagonale:

$$\langle \tilde{k}|h|\tilde{j}\rangle = \epsilon_k \delta_{kj}. \tag{32}$$

Il determinante di Slater di singola particella $|\Phi\rangle$ diventa:

$$|\Phi'\rangle = det(S)|\Phi\rangle. \tag{33}$$

Dato che S è unitaria $|det(S)| = 1$ e $|\Phi\rangle$ è invariante per la trasformazione di base. Allora anche il funzionale $E(\Phi)$ e la sua variazione sono invarianti per una trasformazione unitaria di base.

Ridefiniamo $|\tilde{k}\rangle$ come $|k\rangle$ e otteniamo:

$$\langle k|t|k\rangle + \sum_j [\langle kj|V|kj\rangle - \langle kj|V|jk\rangle] = \epsilon_k \langle k|k\rangle = \langle k|h|k\rangle \tag{34}$$

e dividendo per $|k\rangle$:

$$h|k\rangle = t|k\rangle + \sum_j [\langle j|V|j\rangle |k\rangle - \langle j|V|k\rangle |j\rangle] = \epsilon_k |k\rangle. \tag{35}$$

Questa è l'equazione Hartree-Fock.

Esplicitando i vari termini, il k-esimo stato è rappresentato dalla funzione d'onda $\phi_k(\mathbf{r})$ e l'energia cinetica t da $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$. Definiamo:

$$U(\mathbf{r}) \equiv \sum_j \langle j|V|j\rangle = \sum_j \int d^3r' \phi_j^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}') \tag{36}$$

e

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \sum_j \phi_j^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}'). \tag{37}$$

Riscriviamo l'equazione (35) come:

$$\begin{aligned} h\phi_k(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \phi_k(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\phi_k(\mathbf{r}) + \\ &- \int W(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\phi_k(\mathbf{r}') d^3r' = \epsilon_k \phi_k(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{38}$$

dove il termine:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \phi_k(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\phi_k(\mathbf{r}) \tag{39}$$

dicesi termine di Hartree mentre

$$-\int W(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\phi_k(\mathbf{r}') d^3r' \tag{40}$$

è il termine di Fock-Dirac.

È possibile dimostrare che ϵ_k è l'energia necessaria per estrarre il k-esimo nucleone (teorema di Koopmans) [Rin80].

3 Equazioni Hartree-Fock con simmetria sferica

Il metodo Hartree-Fock è comunemente applicato a sistemi che godono di simmetria sferica: atomi, molecole, nuclei.

In questo caso l'equazione (35) si semplifica. Il k-esimo stato è rappresentato da:

$$|k\rangle \; \equiv \phi_k(\mathbf{r},\mathbf{s},\mathbf{t}) \; \equiv R_k(r)|l_k\frac{1}{2}j_k m_k t_k\rangle \equiv R_k(r)|k'\rangle. \tag{41}$$

Per semplicità di scrittura ridefiniamo $|k'\rangle$, che contiene la parte angolare, di spin e isospin della funzione d'onda come $|k\rangle$. In un modello a campo medio la densità è data da:

$$\rho(\mathbf{r}) \; = \; \sum_i |\phi_i(\mathbf{r})|^2 \tag{42}$$

dove ϕ_i è la funzione d'onda dell'i-esima particella. Separando parte radiale e parte angolare scriviamo:

$$\rho(\mathbf{r}) \; = \; \sum_{l,m,j} |R^*_{lj}(r)Y^{m*}_{lj}(\Omega)R_{lj}(r)Y^m_{lj}(\Omega)|. \tag{43}$$

Nell'equazione precedente abbiamo indicato con $Y^m_{lj}(\Omega)$ l'armonica sferica di spin [Edm57] data dagli autostati simultanei di $\mathbf{l}^2, \mathbf{s}^2, \mathbf{j}^2, j_z$ che scriviamo come $|l,s,j,j_z\rangle$; questi si ottengono mediante una combinazione lineare degli autostati di $\mathbf{l}^2, l_z$ e di $\mathbf{s}^2, s_z$:

$$|l,s,j,j_z\rangle \; = \; \sum_{\mu,s} \langle l\mu\frac{1}{2}s|jm\rangle Y_{l\mu}(\Omega)\chi^{1/2}_s \tag{44}$$

dove abbiamo indicato con $\langle l\mu\frac{1}{2}s|jm\rangle$ i coefficienti di Clebsch-Gordan [Edm57]. Sostituendo tale espressione per l'armonica sferica di spin abbiamo:

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}) \; = \; \sum_{l,m,j} \; & [R^*_{lj}(r)R_{lj}(r)\textstyle\sum_{\mu,s}\langle l\mu\frac{1}{2}s|jm\rangle Y^*_{l\mu}(\Omega)\chi^{1/2}_s \\ & \qquad \textstyle\sum_{\mu',s'}\langle l\mu'\frac{1}{2}s'|jm\rangle Y_{l\mu'}(\Omega)\chi^{1/2}_{s'}].\end{aligned} \tag{45}$$

Consideriamo l'ortonormalità delle funzioni d'onda di spin e le seguenti proprietà dei coefficienti Clebsch-Gordan:

$$\sum_{m_1,m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j' m' \rangle \; = \; \delta_{jj'} \delta_{mm'} \tag{46}$$

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \; = \; (-1)^{j_1+j_2+j} \langle j - m \; j_2 m_2 | j_1 m_1 \rangle \left(\frac{2j+1}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{47}$$

L'espressione della densità diventa:

$$\rho(\mathbf{r}) \; = \; \sum_{l,j} [|R_{lj}(r)|^2 \frac{2j+1}{2l+1} \sum_{\mu} Y^*_{l\mu}(\Omega) Y_{l\mu}(\Omega)]. \tag{48}$$

Sappiamo che:

$$\sum_{l\mu} Y^*_{l\mu}(\Omega) Y_{l\mu}(\Omega) \; = \; \frac{2l+1}{4\pi} P_l(cos\theta) \tag{49}$$

dove P_l è il polinomio di Legendre di ordine l; nel caso in esame l'angolo per le due armoniche sferiche è lo stesso per cui $P_l(1) = 1$.

Pertanto la densità assume la forma:

$$\rho(\mathbf{r}) \; = \; \sum_{l,j} |R_{lj}(r)|^2 \frac{2j+1}{2l+1} \frac{2l+1}{4\pi} \; = \; \frac{1}{4\pi} \sum_{l,j} (2j+1) |R_{lj}(r)|^2. \tag{50}$$

Integrando la densità nello spazio si ottiene il numero dei nucleoni costituenti il nucleo:

$$\begin{aligned} \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \; = \; \int d\Omega \int dr r^2 \rho(r) \; &= \; \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(cos\theta) \int dr r^2 \rho(r) \; = \\ = 4\pi \int dr r^2 \frac{1}{4\pi} \sum_{l,j} |R_{lj}(r)|^2 (2j+1) \; &= \; \sum_{l,j} (2j+1) \int dr r^2 |R_{lj}(r)|^2 = \\ &= \; \sum_{l,j} (2j+1) \; = \; A. \end{aligned} \tag{51}$$

Dato che vi è simmetria sferica si assume che la variazione della funzione d'onda è data solo sulla parte radiale. L'equazione Hartree-Fock diventa allora:

$$\begin{aligned} &\int dr_1 r_1^2 \delta R^*_k(r_1) \langle k|t|k \rangle R_k(r_1) \; + \\ &+ \sum_j \int dr_1 r_1^2 \delta R^*_k(r_1) \int dr_2 r_2^2 R^*_j(r_2) \langle kj|V|kj \rangle R_k(r_1) R_j(r_2) \; + \\ &- \sum_j \int dr_1 r_1^2 \delta R^*_k(r_1) \int dr_2 r_2^2 R^*_j(r_2) \langle kj|V|jk \rangle R_k(r_2) R_j(r_1) \; = \; \epsilon_k. \end{aligned} \tag{52}$$

Supponiamo che $\delta R_k(r_1) \neq 0$ solo per $r_1 = r$; questo equivale ad inserire nella (52) $\delta R_k^*(r_1)\delta(r_1 - r)$ al posto di $\delta R_k^*(r_1)$.

Dividendo primo e secondo membro per $\delta R_k^*(r_1)$ si ha:

$$\begin{aligned} \langle k|t|k\rangle R_k(r) + \sum_j \int dr_2 r_2^2 R_j^2(r_2) \langle kj|V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|)|kj\rangle R_k(r) \ &+ \\ - \sum_j \int dr_2 r_2^2 R_j^*(r_2) R_j(r) \langle kj|V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|)|jk\rangle R_k(r_2) \ &= \ \epsilon_k R_k(r). \end{aligned} \tag{53}$$

Introduciamo i termini:

$$U(r) \ = \ \int dr_2 r_2^2 \sum_j R_j^2(r_2) \langle kj|V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|)|kj\rangle \tag{54}$$

e

$$W(r, r_2) \ = \ \sum_j R_j(r) R_j(r_2) \langle kj|V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|)|jk\rangle \tag{55}$$

e l'equazione diventa:

$$\begin{aligned} \langle k|t|k\rangle R_k(r) + U(r) R_k(r) \ &+ \\ - \int dr_2 r_2^2 W(r, r_2) R_k(r_2) \ &= \ \epsilon_k R_k(r). \end{aligned} \tag{56}$$

Definiamo la funzione d'onda:

$$u_{nlj}^t(r) \ = \ r R_{nlj}^t(r). \tag{57}$$

Per cui:

$$\phi_k(\mathbf{r}) \ = \ \frac{1}{r} u_{nlj}^t(r) Y_{lj}^m(\Omega) \chi_t \equiv \frac{1}{r} u_{nlj}^t(r) |ljm\rangle. \tag{58}$$

Pertanto l'equazione Hartree-Fock in coordinate polari sferiche può essere scritta come:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{nlj}^t(r) + U(r) u_{nlj}^t(r) \ + \\ & - \int dr_2 \sum_{n_1, l_1, j_1, m_1, t_1} [u_{n_1 l_1 j_1}^{t_1}(r) u_{n_1 l_1 j_1}^{t_1}(r_2) \\ & \langle ljm|\langle l_1 j_1 m_1|V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|)|ljm\rangle|l_1 j_1 m_1\rangle \\ & u_{nlj}^t(r_2)] \ = \ \epsilon_{nlj} u_{nlj}^t(r). \end{aligned} \tag{59}$$

Dalla risoluzione di tale equazione otteniamo le funzioni d'onda di singola particella u^t_{nlj} e i corrispondenti autovalori ϵ_{nlj}.

Possiamo calcolare i valori degli osservabili densità di carica e energia di legame:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n,l,j} (2j+1) |R_{nlj}(r)|^2. \tag{60}$$

$$E = \sum_{n,l,j} \epsilon_{nlj} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle ij | V_{ij} | ij \rangle. \tag{61}$$

4 Soluzione numerica delle equazioni Hartree-Fock

La soluzione numerica dell'equazione Hartree-Fock (59) è basata su un metodo iterativo.

Per risolvere tale equazione dobbiamo conoscere i termini U e W le cui espressioni (54) e (55) sono legate alle funzioni d'onda di singola particella.

Per la prima soluzione del ciclo, utilizziamo le funzioni d'onda di singola particella ottenute risolvendo l'equazione di Schrödinger con un potenziale medio.

Nel nostro caso usiamo il potenziale di Woods-Saxon:

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{(r-R)/a}} \tag{62}$$

dove r è la distanza dal centro del nucleo, V_0, R e a sono parametri. Una possibile parametrizzazione è V_0 = -50 MeV, a = 0.5 fm, R = $r_0 A^{1/3}$ fm, dove r_0 = 1.2 fm.

Ottenuta una stima dei valori di U e W, con le funzioni d'onda trovate, risolviamo l'equazione (59) con il metodo di Noumerov e troviamo le funzioni d'onda u^t_{nlj} e i corrispondenti autovalori ϵ_{nlj}.

A questo punto possiamo avere una nuova stima di U e W utilizzando le nuove funzioni d'onda.

Il processo continua calcolando U e W con le nuove funzioni d'onda e risolvendo l'equazione Hartree-Fock fino ad arrivare a convergenza. Questa si ottiene quando l'energia di legame (61) ottenuta ad una certa iterazione si discosta da quella dell'iterazione precedente di una certa quantità fissata.

A volte la convergenza viene accelerata se, al posto di considerare semplicemente le funzioni d'onda dell'ultimo ciclo iterativo, si considera una combinazione lineare delle funzioni d'onda ottenute negli ultimi due cicli. Questa tecnica è chiamata metodo del rilassamento [Rei91].

5 Interazione effettiva di Skyrme

Il metodo Hartree-Fock presentato è utilizzato in fisica nucleare per descrivere le proprietà dello stato fondamentale dei nuclei doppio magici che sono sferici.

Come visto in precedenza, l'unico input della teoria Hartree-Fock è l'interazione fra due nucleoni. In letteratura sono state utilizzate varie interazioni nucleone-nucleone.

Una delle interazioni di maggior successo è quella di Skyrme, proposta negli anni '50 [Sky59]. I valori dei parametri sono stati fissati, e modificati nei decenni successivi [Vau72],[Kri80], etc.

L'interazione di Skyrme è una forza a raggio nullo, dipendente dalla densità dei nucleoni nel nucleo e dal momento relativo dei due nucleoni interagenti:

$$\begin{aligned} V_{Skyrme} = \quad & t_0(1+x_0P_x)\delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j) \\ & +\frac{1}{2}t_1(1+x_1P_x)[\mathbf{p}_{ij}^2\delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)+\delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)\mathbf{p}_{ij}^2] \\ & +t_2(1+x_2P_x)\mathbf{p}_{ij}\cdot\delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)\mathbf{p}_{ij} \\ & +\frac{1}{6}t_3(1+x_3P_x)\rho^\alpha(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j) \\ & +it_4\mathbf{p}_{ij}\cdot\delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)(\sigma_i+\sigma_j)\times\mathbf{p}_{ij} \end{aligned} \tag{63}$$

dove $\mathbf{p}_{ij}=\mathbf{p}_i-\mathbf{p}_j$ è il momento relativo, P_x è l'operatore di scambio fra $\mathbf{r}_i$ e $\mathbf{r}_j$ posizioni dei due nucleoni rispetto ad un centro fissato, σ indica le matrici spinoriali di Pauli, $\mathbf{r}=\frac{1}{2}(\mathbf{r}_i+\mathbf{r}_j)$, mentre t_o, t_1, t_2, t_3, t_4, x_0, x_1, x_2, x_3, α sono parametri.

Nei calcoli Hartree-Fock all'interazione di Skyrme, che parametrizza l'interazione forte fra due nucleoni, va aggiunta l'interazione coulombiana fra i protoni.

La caratteristica che fa dell'interazione di Skyrme la più utilizzata nei calcoli Hartree-Fock è il fatto di essere un'interazione di contatto. La presenza del termine $\delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)$ fa in modo che gli integrali delle equazioni (56) e (59) possano essere valutati analiticamente alleggerendo notevolmente il peso del calcolo numerico.

A questa semplicità d'uso l'interazione di Skyrme aggiunge una notevole flessibilità, data la dipendenza dalla densità e dall'impulso.

Uno dei vantaggi dei calcoli Hartree-Fock è la possibilità di descrivere contemporaneamente quantità differenti come l'energia di legame, la densità di carica, la distribuzione del momento dei nuclei, quantità che generalmente sono ottenute mediante approcci fenomenologici diversi.

La parametrizzazione dell'interazione di Skyrme è determinata richiedendo che riproduca le energie totali e le distribuzioni di carica dei nuclei magici nei calcoli Hartree-Fock.

Storicamente si sono affermate varie parametrizzazioni dell'interazione di Skyrme. Nei calcoli eseguiti si sono usate le parametrizzazioni SkII [Vau72], SkIII [Bei75], SkM [Kri80]. I valori dei parametri sono dati in tab.1.

Tabella 1: Parametri delle interazioni di Skyrme usati nel lavoro. t_0 è espresso in $MeVfm^3$, t_1 in $MeVfm^5$, t_2 in $MeVfm^5$, t_3 in $MeVfm^6$, t_4 in $MeVfm^8$, mentre x_0, x_1, x_2, x_3, α sono adimensionali.

	t_0	t_1	t_2	t_3	t_4	x_0	x_1	x_2	x_3	α
SkII	-1169.9	586.6	-27.1	9331.1	105.0	0.34	0	0	0	0
SkIII	-1128.75	395.0	-95.0	14000.0	120.0	0.45	0	0	0	0
SkM	-2645	385	-120	15595	130	0.09	0	0	0	0

6 Risultati dei calcoli Hartree-Fock con l'interazione effettiva di Skyrme

In questo paragrafo presentiamo i risultati di calcoli Hartree-Fock con le parametrizzazioni SkII, SkIII, SkM per i nuclei ^{12}C,^{16}O,^{40}Ca,^{48}Ca,^{208}Pb.

Le energie di legame calcolate sono confrontate con i valori sperimentali [Aud93] in tab.2.

Tabella 2: La seguente tabella riporta il confronto fra i valori dell'energia di legame, espressi in MeV, ottenuti dai calcoli Hartree-Fock con le tre interazioni di Skyrme e i valori sperimentali.

Nuclei	SkII	SkIII	SkM	Exp
^{12}C	-83.915	-90.783	-88.755	-92.161
^{16}O	-128.64	-128.14	-124.52	-127.68
^{40}Ca	-342.45	-341.45	-341.20	-342.00
^{48}Ca	-404.69	-411.32	-420.99	-416.16
^{208}Pb	-1553.9	-1573.1	-1651.5	-1636.9

Per facilitare il confronto mostriamo in tab.3 le energie di legame per nucleone e in tab.4 le variazioni relative delle energie calcolate rispetto ai valori sperimentali:

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{E_{HF} - E_{Exp}}{E_{HF}} \tag{64}$$

È rilevante notare come tali scarti siano maggiori nel caso del nucleo non magico ^{12}C, in particolare per la parametrizzazione SkII, scarto pari a 0.098, rispetto agli altri nuclei doppio magici.

Per il nucleo ^{16}O le parametrizzazioni SkII e SkIII forniscono risultati in ottimo accordo con i valori sperimentali, mentre per la parametrizzazione SkM si ha uno scarto relativo lievemente superiore.

Nel caso del nucleo ^{40}Ca vi è un ottimo accordo fra i risultati forniti dai calcoli con le tre interazioni e i valori sperimentali.

Per i nuclei più pesanti, in particolare il ^{208}Pb, gli scarti dai valori sperimentali aumentano, soprattutto con la SkII e sono un ordine di grandezza maggiori.

Inoltre, sempre da tab.4, si nota come SkIII fornisca ottimi risultati per i nuclei leggeri, SkII per il ^{40}Ca e SkM per i nuclei pesanti.

Tabella 3: La seguente tabella riporta il confronto fra i valori dell'energia di legame per nucleone, espressi in MeV, ottenuti dai calcoli Hartree-Fock con le tre interazioni di Skyrme e i valori sperimentali.

Nuclei	SkII	SkIII	SkM	Exp
^{12}C	-6.99	-7.57	-7.40	-7.68
^{16}O	-8.04	-8.01	-7.78	-7.98
^{40}Ca	-8.56	-8.54	-8.53	-8.55
^{48}Ca	-8.43	-8.57	-8.77	-8.67
^{208}Pb	-7.47	-7.56	-7.94	-7.87

Tabella 4: La seguente tabella riporta le variazioni relative dei valori delle energie di legame ottenute con le tre parametrizzazioni rispetto ai valori sperimentali.

Nuclei	SkII	SkIII	SkM
^{12}C	0.098	0.015	0.038
^{16}O	0.007	0.003	0.025
^{40}Ca	0.001	0.002	0.002
^{48}Ca	0.028	0.018	0.011
^{208}Pb	0.053	0.041	0.009

I calcoli Hartree-Fock eseguiti forniscono, inoltre, le densità di carica dei nuclei. Una prima analisi dei risultati per le distribuzioni di carica può essere effettuata osservando fig.1.

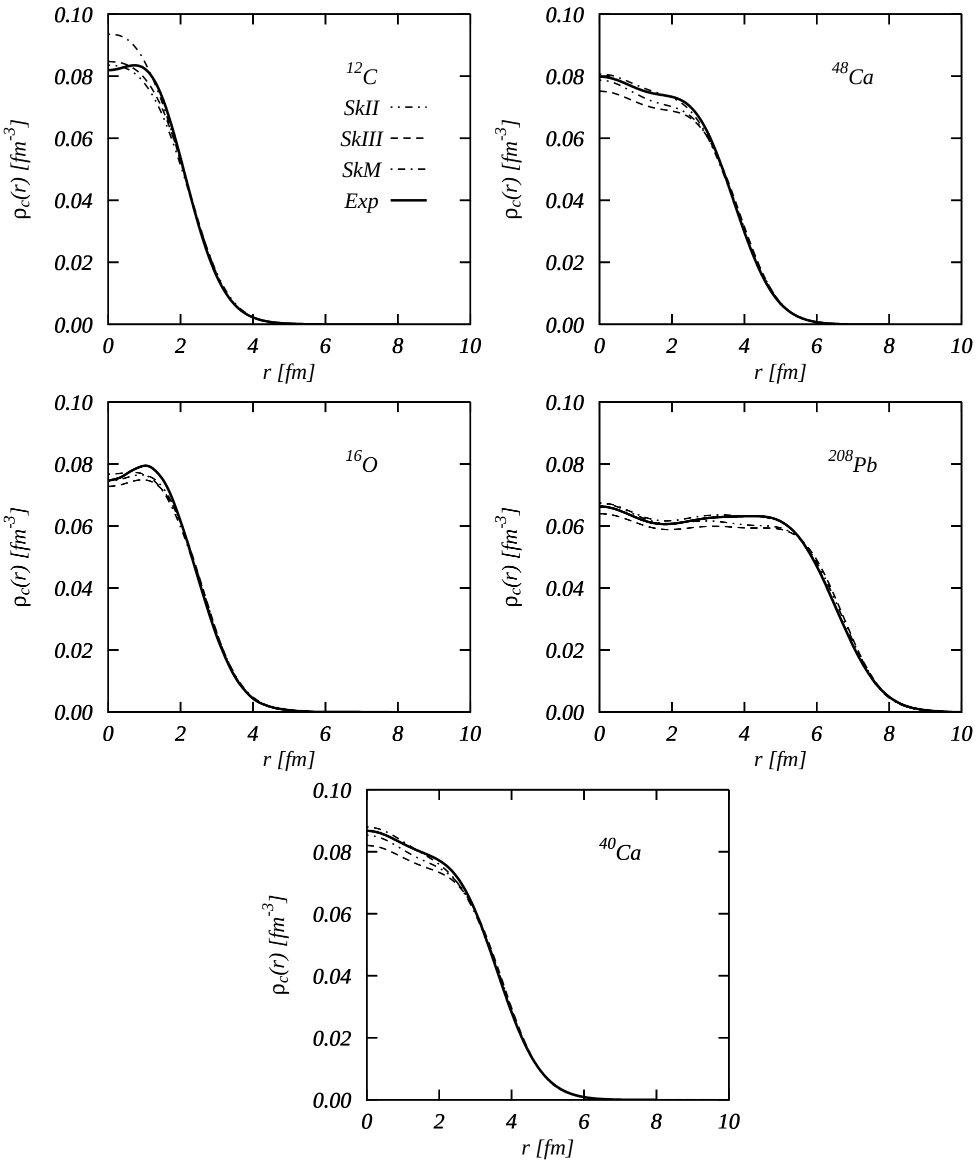


Figura 1: I grafici mostrano il confronto fra gli andamenti delle distribuzioni di carica ottenuti con i calcoli Hartree-Fock con le interazioni di Skyrme e quelli sperimentali per i nuclei studiati.

Un'analisi più accurata può essere condotta confrontando i valori della densità di carica ottenuti dai calcoli con quelli sperimentali [deV87]. In tab.5 si riportano i valori di tale grandezza al centro del nucleo.

Tabella 5: La seguente tabella riporta il confronto fra i valori della densità di carica al centro del nucleo espressi in fm^{-3}.

Nuclei	SkII	SkIII	SkM	Exp
^{12}C	0.084	0.085	0.094	0.082
^{16}O	0.074	0.072	0.077	0.074
^{40}Ca	0.085	0.082	0.088	0.087
^{48}Ca	0.079	0.075	0.080	0.080
^{208}Pb	0.067	0.064	0.067	0.066

Inoltre si sono calcolate le variazioni di densità di carica ottenuta dai calcoli rispetto ai valori sperimentali, per varie distanze dal centro del nucleo:

$$\Delta\rho = \rho_{HF} - \rho_{Exp} \tag{65}$$

In fig.2 si riportano gli andamenti delle variazioni in funzione della distanza dal centro del nucleo.

Da fig.1 e tab.5 si nota che nella parte centrale del nucleo ^{12}C, $0-2$ fm, le tre parametrizzazioni, in particolare la SkM, forniscono distribuzioni di carica che si discostano dalla distribuzione sperimentale; in effetti come mostra fig.2 in tale zona si hanno gli scarti maggiori dall'andamento sperimentale.

Oltre i 2 fm le distribuzioni si sovrappongono a quella sperimentale e le variazioni diventano irrilevanti nella zona superficiale del nucleo, oltre i 4 fm.

Nel caso dell' ^{16}O SkII dà un valore di densità al centro del nucleo in accordo con quello sperimentale mentre quelli forniti da SkIII e SkM si discostano lievemente. Anche per ^{16}O i calcoli forniscono una buona descrizione della superficie come si osserva in fig.2.

Per ^{40}Ca, ^{48}Ca, ^{208}Pb le tre parametrizzazioni ed in particolare SkM forniscono risultati in ottimo accordo con l'esperienza; SKIII sembra essere la parametrizzazione meno buona.

Il buon accordo fra i risultati ottenuti e le evidenze sperimentali mostra come la forza effettiva di Skyrme sia una buona interazione per il modello a campo medio della teoria Hartree-Fock.

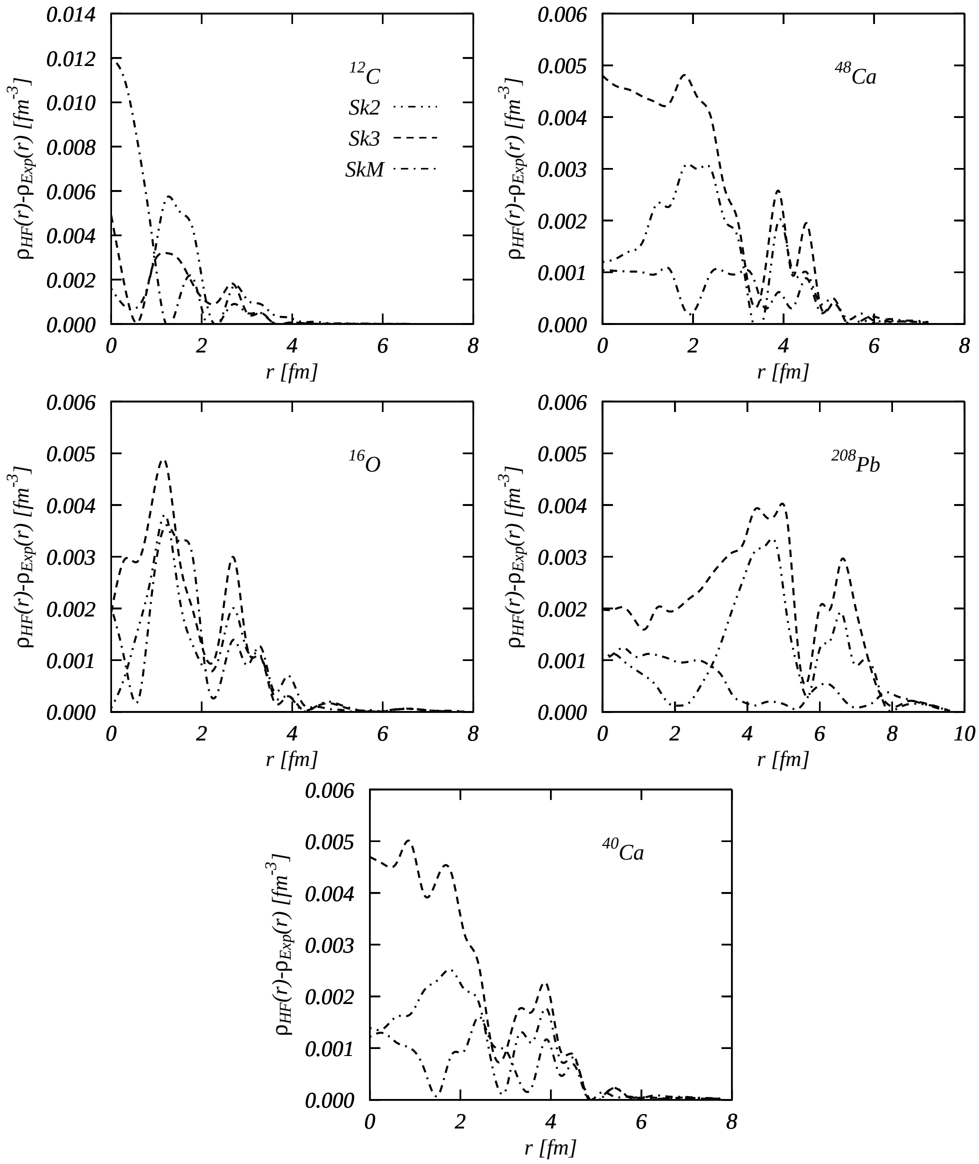


Figura 2: I grafici mostrano il confronto fra gli andamenti delle variazioni della densità di carica prevista dalle Skyrme rispetto a quella sperimentale.

Presentiamo, inoltre, le distribuzioni di protoni fig.3, di neutroni fig.4 e di materia nucleare fig.5.

Come si può notare dal confronto fra fig.1 e fig.3 l'andamento della distribuzione di protoni è simile a quello della distribuzione di carica.

Per i nuclei leggeri le tre Skyrme forniscono andamenti che si discostano l'uno dall'altro nella parte centrale del nucleo, in particolare SkM dà una distribuzione di protoni più alta rispetto alle altre due; nella zona superficiale gli andamenti si sovrappongono. Per i nuclei più pesanti, in particolare ^{208}Pb, l'accordo fra gli andamenti rimane meno netto anche per distanze maggiori dal centro del nucleo.

Osservando fig.3 e fig.4, si nota che per i nuclei in cui vi è simmetria fra protoni e neutroni, le distribuzioni di neutroni sono simili alle distribuzioni di protoni; per ^{48}Ca e ^{208}Pb tali distribuzioni sono profondamente diverse e la densità di neutroni è maggiore rispetto a quella di protoni, dato il maggior numero di neutroni presenti nel nucleo.

La parametrizzazione SkM fornisce un andamento della distribuzione più elevato rispetto alle altre parametrizzazioni.

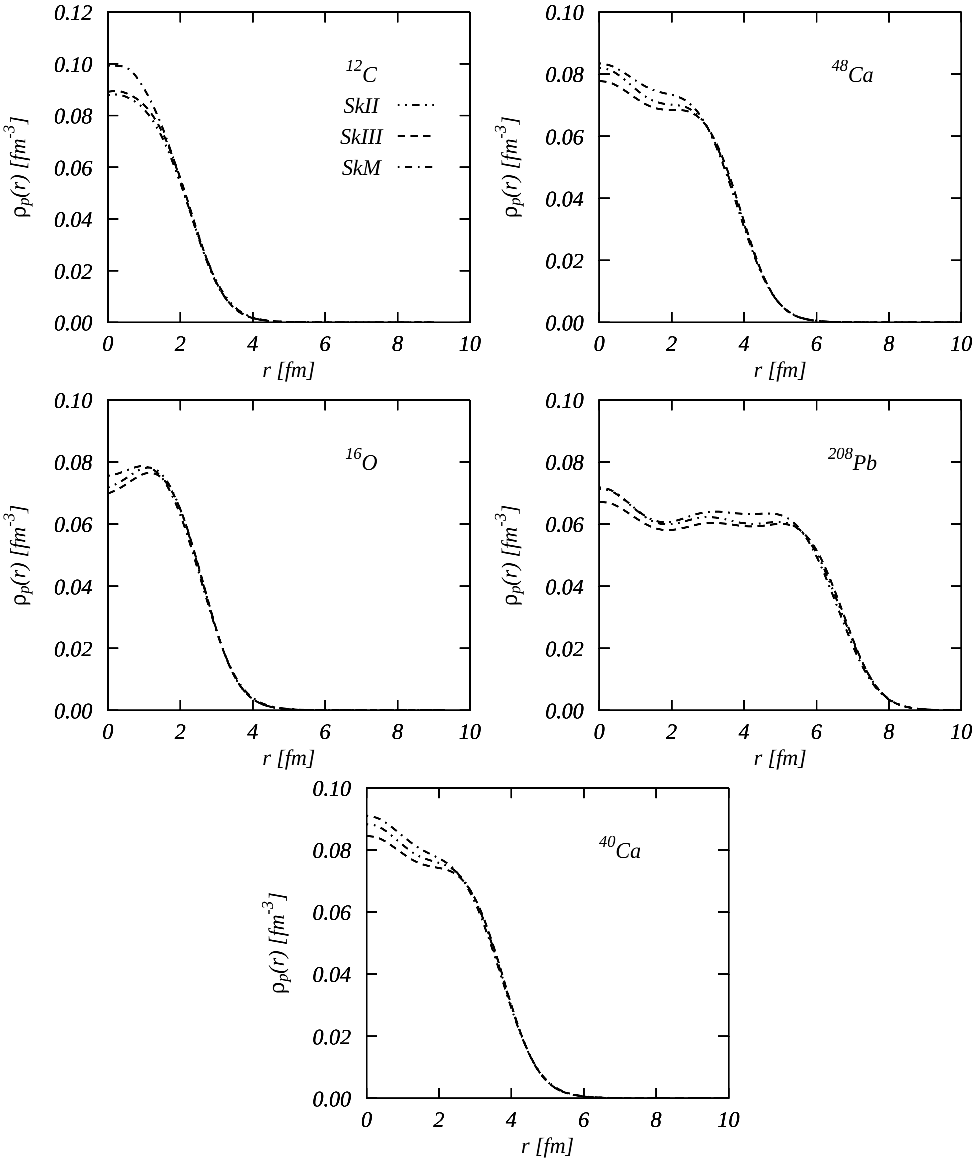


Figura 3: I grafici mostrano il confronto fra gli andamenti delle distribuzioni di protoni ottenute con i calcoli Hartree-Fock con le interazioni di Skyrme per i nuclei studiati.

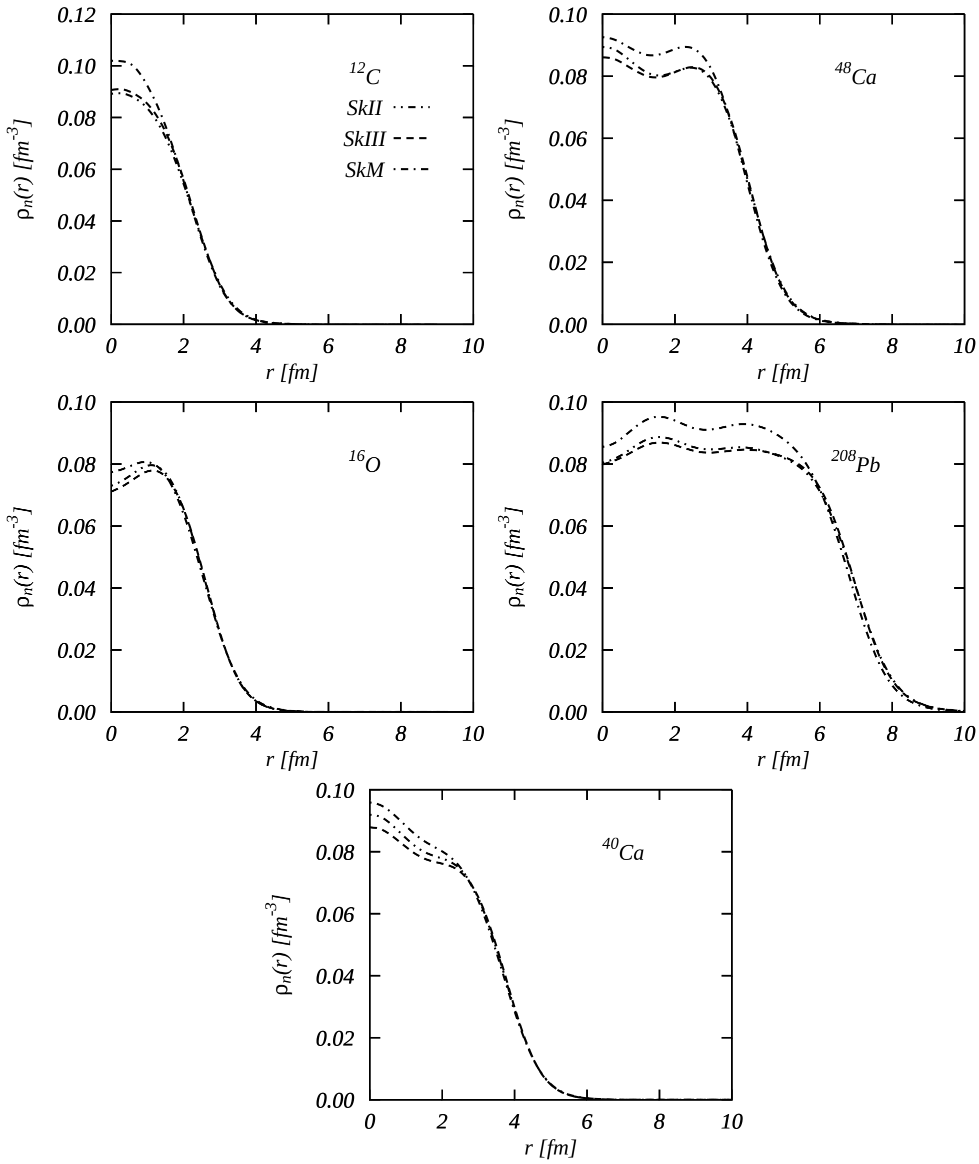


Figura 4: I grafici mostrano il confronto fra gli andamenti delle distribuzioni di neutroni ottenute con i calcoli Hartree-Fock con le interazioni di Skyrme per i nuclei studiati.

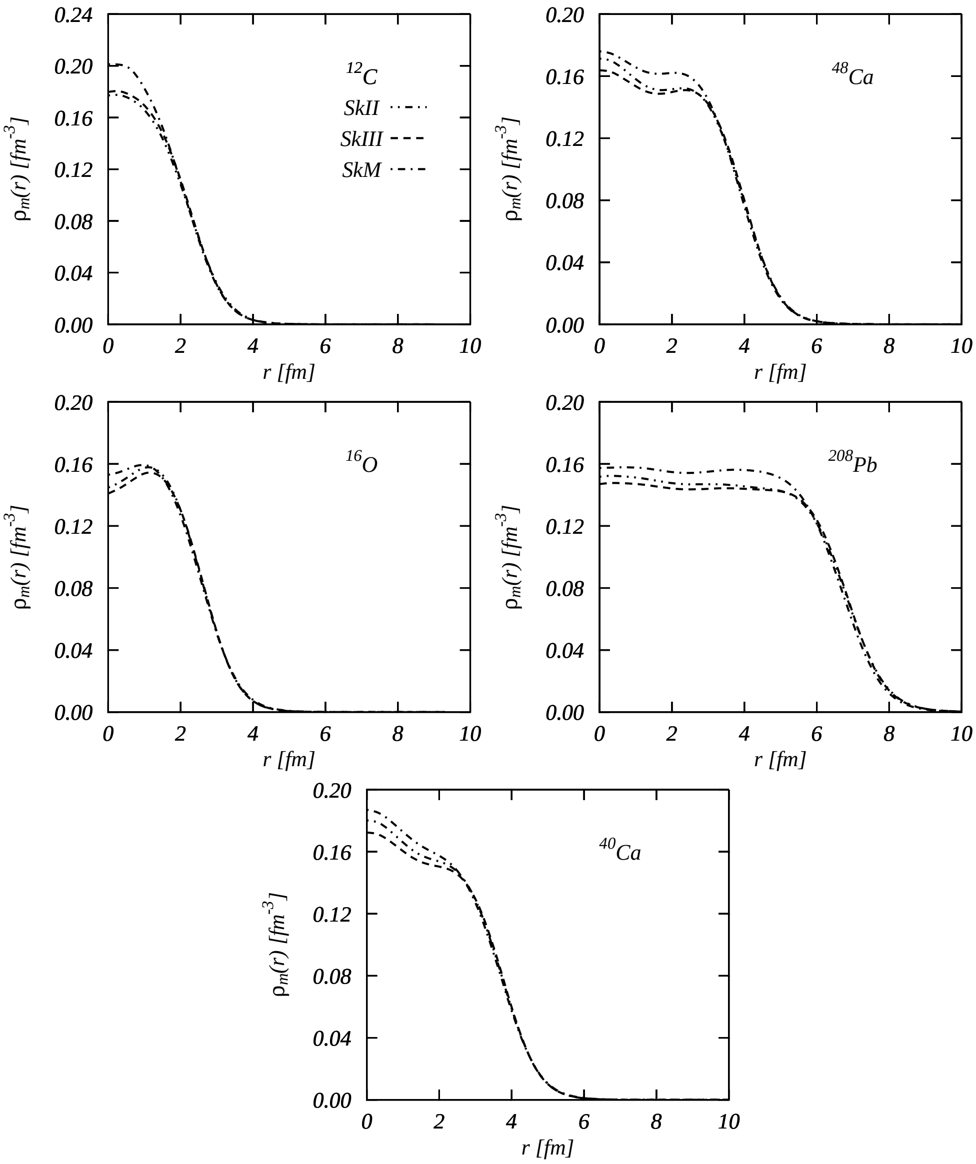


Figura 5: I grafici mostrano il confronto fra gli andamenti delle distribuzioni di materia nucleare ottenute con i calcoli Hartree-Fock con le interazioni di Skyrme per i nuclei studiati.

Infine, presentiamo, nelle seguenti tabelle, i livelli energetici (in MeV) di particella singola per i vari nuclei. Riportiamo i valori energetici ottenuti dai calcoli e i valori sperimentali dei livelli energetici più esterni presi dalla letteratura, per i nuclei ^{12}C [Co84], ^{16}O e ^{40}Ca [Co87], ^{208}Pb [Spe78].

Osservando le tabelle degli spettri si nota che le tre Skyrme danno valori differenti fra loro. In particolare i valori forniti da SkII si discostano dai valori dati da SkIII e SkM che sono fra loro vicini.

Notiamo, inoltre, che i livelli energetici dei neutroni sono più bassi rispetto a quelli dei protoni. I neutroni, infatti, sono più legati poichè a differenza dei protoni non sono soggetti all'interazione coulombiana repulsiva.

Tabella 6: La seguente tabella riporta lo spettro energetico (in MeV) di protoni e di neutroni del ^{12}C fornito dai calcoli e quello sperimentale. j,l,n sono i numeri quantici associati rispettivamente al momento angolare totale, al momento angolare orbitale e all'energia.

^{12}C	j	l	n	E			
				SkII	SkIII	SkM	Exp
Protoni	1/2	0	1	-35.967	-30.024	-29.875	
	3/2	1	1	-14.302	-14.060	-14.518	-15.96
Neutroni	1/2	0	1	-38.826	-32.848	-32.831	
	3/2	1	1	-16.964	-16.749	-17.295	-18.72

Tabella 7: La seguente tabella riporta lo spettro energetico (in MeV) di protoni e di neutroni del nucleo ^{16}O.

^{16}O	j	l	n	E			
				SkII	SkIII	SkM	Exp
Protoni	1/2	0	1	-38.513	-31.344	-30.447	
	3/2	1	1	-18.724	-17.140	-16.950	-18.44
	1/2	1	1	-13.383	-11.188	-10.463	-12.11
Neutroni	1/2	0	1	-42.131	-34.866	-34.050	
	3/2	1	1	-22.157	-20.536	-20.390	-21.81
	1/2	1	1	-16.743	-14.503	-13.778	-15.65

Tabella 8: La seguente tabella riporta lo spettro energetico (in MeV) di protoni e di neutroni del ^{40}Ca.

^{40}Ca	j	l	n	E			
				SkII	SkIII	SkM	Exp
Protoni	1/2	0	1	-47.719	-37.119	-36.870	
	3/2	1	1	-31.845	-26.326	-25.885	
	1/2	1	1	-28.757	-22.994	-21.791	
	5/2	2	1	-16.150	-14.833	-14.699	-14.73
	3/2	2	1	-10.541	-8.6075	-7.6316	-8.30
	1/2	0	2	-10.018	-8.9044	-9.8270	-10.33
Neutroni	1/2	0	1	-55.185	-44.389	-44.405	
	3/2	1	1	-39.098	-33.447	-33.206	
	1/2	1	1	-35.966	-30.068	-29.023	
	5/2	2	1	-23.143	-21.778	-21.785	-21.60
	3/2	2	1	-17.431	-15.442	-14.528	-15.60
	1/2	0	2	-16.944	-15.798	-16.872	-18.20

Tabella 9: La seguente tabella riporta lo spettro energetico (in MeV) di protoni e di neutroni del ^{48}Ca.

^{48}Ca	j	l	n	E		
				SkII	SkIII	SkM
Protoni	1/2	0	1	-54.555	-44.588	-43.089
	3/2	1	1	-40.139	-34.633	-32.760
	1/2	1	1	-37.648	-31.914	-29.357
	5/2	2	1	-24.826	-23.433	-21.696
	3/2	2	1	-19.842	-17.855	-15.059
	1/2	0	2	-17.614	-16.587	-15.828
Neutroni	1/2	0	1	-54.476	-42.865	-44.856
	3/2	1	1	-38.493	-31.428	-33.228
	1/2	1	1	-36.283	-29.056	-30.200
	5/2	2	1	-22.647	-19.802	-21.706
	3/2	2	1	-17.789	-14.392	-15.111
	1/2	0	2	-17.213	-15.056	-17.056
	7/2	3	1	-8.1109	-8.4528	-10.574

Tabella 10: La seguente tabella riporta lo spettro energetico (in MeV) di protoni del ^{208}Pb.

^{208}Pb	j	l	n	E			
				SkII	SkIII	SkM	Exp
Protoni	1/2	0	1	-55.269	-43.739	-41.142	
	3/2	1	1	-48.837	-39.323	-36.499	
	1/2	1	1	-48.386	-38.830	-35.898	
	5/2	2	1	-40.895	-33.667	-30.685	
	3/2	2	1	-39.817	-32.469	-29.190	
	1/2	0	2	-35.992	-29.318	-26.372	
	7/2	3	1	-31.890	-27.112	-24.064	
	5/2	3	1	-29.865	-24.858	-21.251	
	3/2	1	2	-25.121	-21.280	-18.454	
	1/2	1	2	-24.225	-20.321	-17.326	
	9/2	4	1	-22.179	-19.878	-16.870	
	7/2	4	1	-18.905	-16.245	-12.388	-11.508
	5/2	2	2	-14.138	-12.900	-10.408	-9.708
	3/2	2	2	-12.542	-11.185	-8.4456	-8.385
	1/2	0	3	-10.933	-10.031	-7.7647	-8.034
	11/2	5	1	-12.062	-12.115	-9.2503	-9.375

Tabella 11: La seguente tabella riporta lo spettro energetico (in MeV) di neutroni del ^{208}Pb.

^{208}Pb	j	l	n	E			
				SkII	SkIII	SkM	Exp
Neutroni	1/2	0	1	-60.305	-46.564	-49.744	
	3/2	1	1	-53.677	-42.046	-45.008	
	1/2	1	1	-53.226	-41.548	-44.394	
	5/2	2	1	-45.700	-36.428	-39.209	
	3/2	2	1	-44.630	-35.221	-37.699	
	1/2	0	2	-41.520	-32.735	-35.469	
	7/2	3	1	-36.734	-29.992	-32.652	
	5/2	3	1	-34.718	-27.713	-29.800	
	3/2	1	2	-30.664	-24.819	-27.574	
	1/2	1	2	-29.737	-23.807	-26.350	
	9/2	4	1	-27.126	-22.952	-25.555	
	7/2	4	1	-23.834	-19.251	-20.965	
	5/2	2	2	-19.906	-16.773	-19.673	
	3/2	2	2	-18.190	-14.922	-17.481	
	1/2	0	3	-17.164	-14.356	-17.329	
	11/2	5	1	-17.208	-15.472	-18.072	
	9/2	5	1	-12.398	-10.086	-11.487	-10.768
	7/2	3	2	-9.5922	-8.7063	-11.782	-9.717
	5/2	3	2	-7.2189	-6.1322	-8.7398	-7.947
	3/2	1	3	-6.4605	-5.8438	-8.9870	-8.275
	1/2	1	3	-5.6075	-4.9278	-7.8600	-7.377
	13/2	6	1	-7.2922	-7.6801	-10.308	-9.010

Per visualizzare meglio i risultati ottenuti, riportiamo nelle seguenti figure gli spettri energetici di singola particella.

Notiamo, in fig.6 e fig.7 per ^{12}C, fig.8 e fig.9 per ^{16}O, che le tre parametrizzazioni danno valori dei livelli energetici più esterni compatibili con quelli sperimentali [Co84], [Co87]; per il livello interno, 1s 1/2, SkII fornisce un valore molto più basso rispetto a quelli di SkIII e SkM.

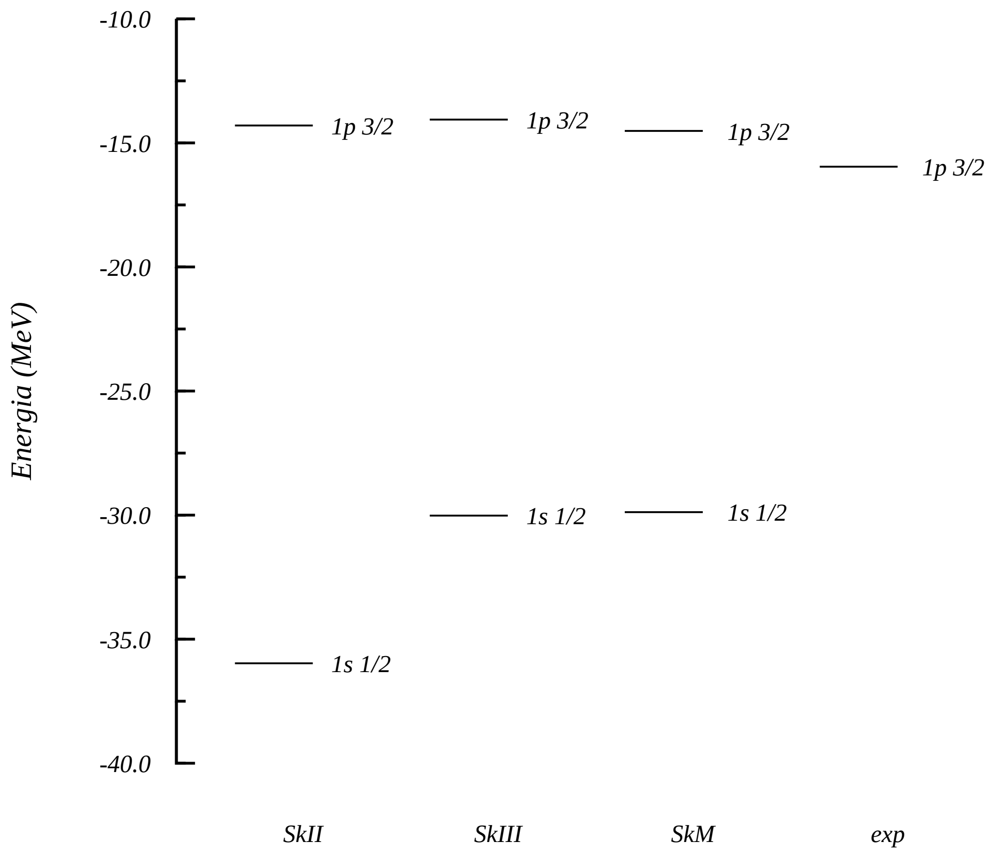


Figura 6: ^{12}C. Spettro energetico dei protoni.

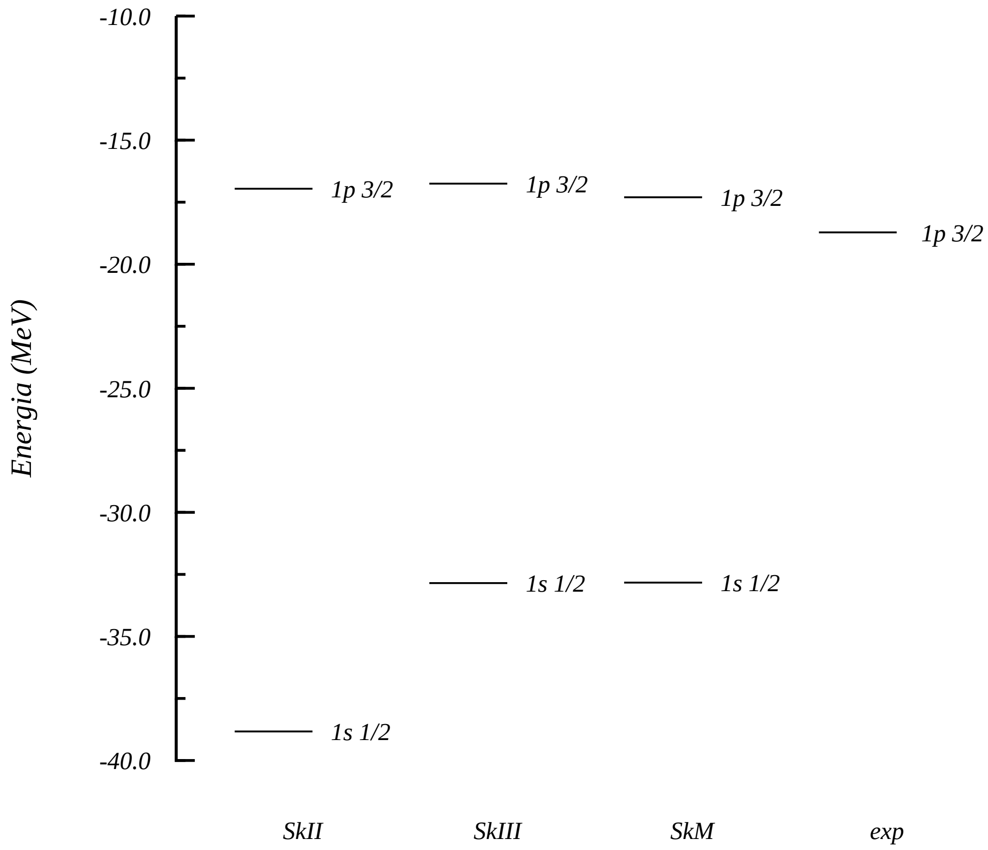


Figura 7: ^{12}C. Spettro energetico dei neutroni.

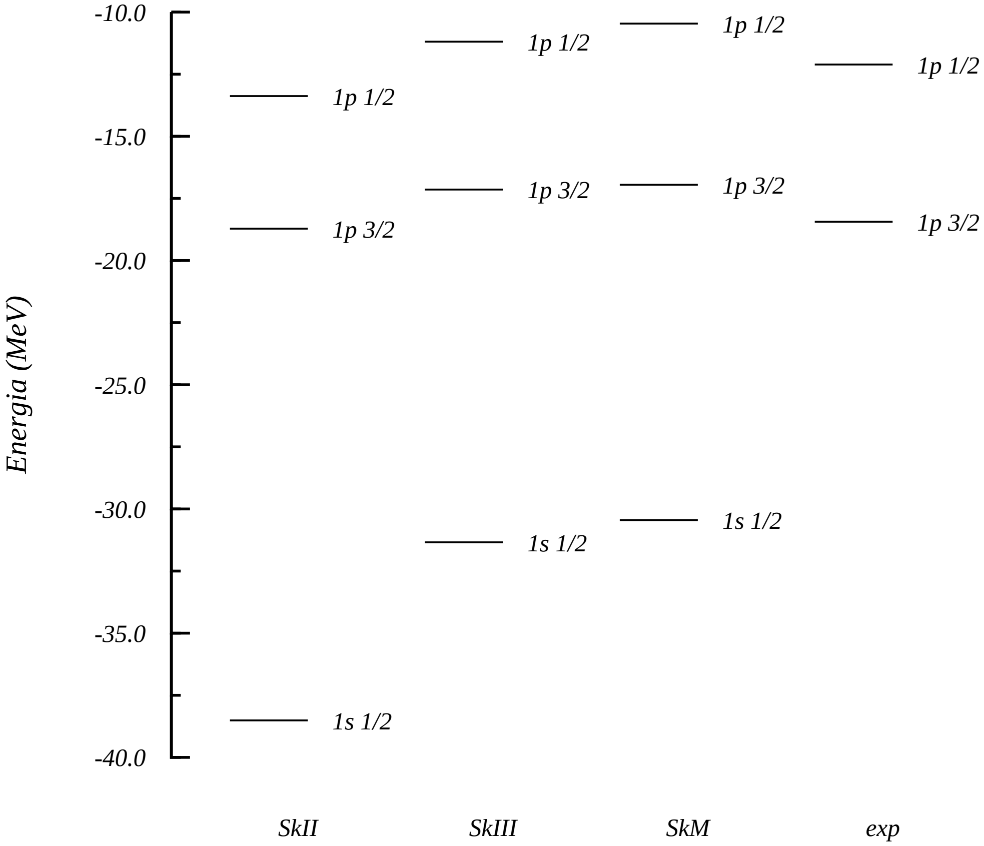


Figura 8: ^{16}O. Spettro energetico dei protoni.

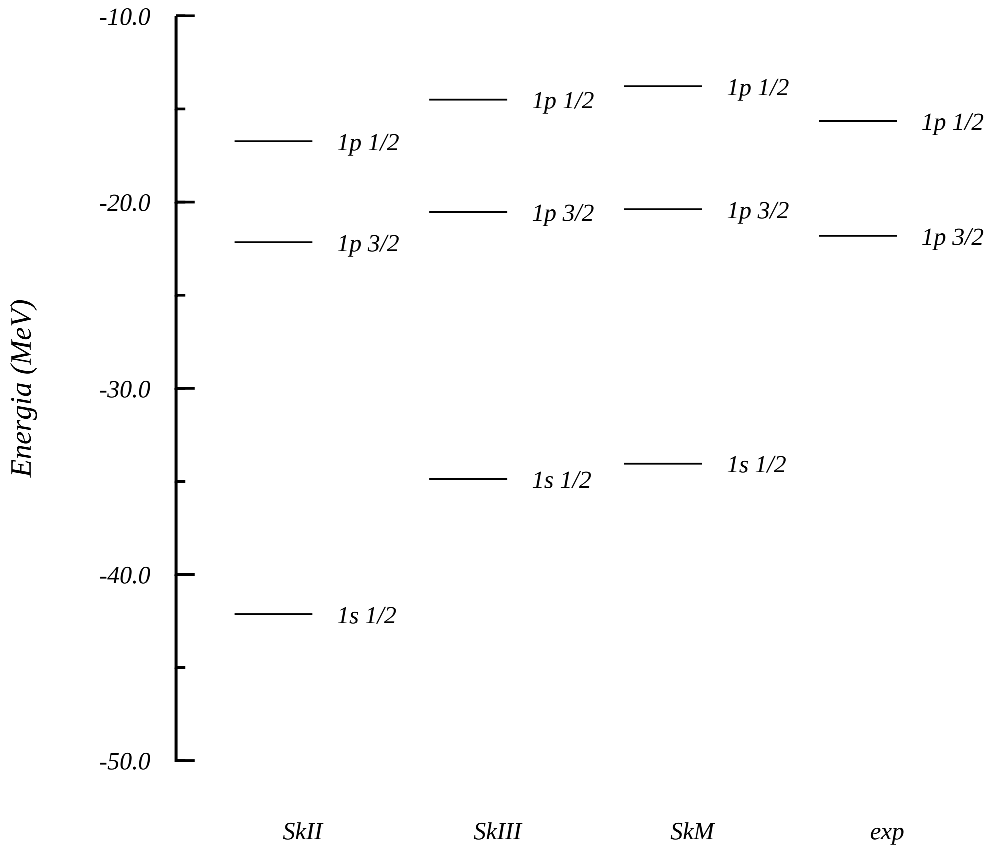


Figura 9: ^{16}O. Spettro energetico dei neutroni.

Anche nel caso del ^{40}Ca, fig.10 e fig.11, per i livelli più interni, 1s 1/2, 1p 3/2, 1p 1/2, SkII fornisce valori più bassi rispetto alle altre parametrizzazioni. Per il livello 1d 5/2 i valori sono compatibili con quello sperimentale. Le evidenze sperimentali mostrano che il livello 2s 1/2 è più basso rispetto a 1d 3/2 e i due livelli sono ben separati. Tale situazione è resa bene da SkM che però fornisce valori più elevati.

Con SkIII non abbiamo la separazione netta fra i due livelli. Nel caso di SkII i valori dei due livelli più esterni sono invertiti, con 2s 1/2 più elevato rispetto a 1d 3/2.

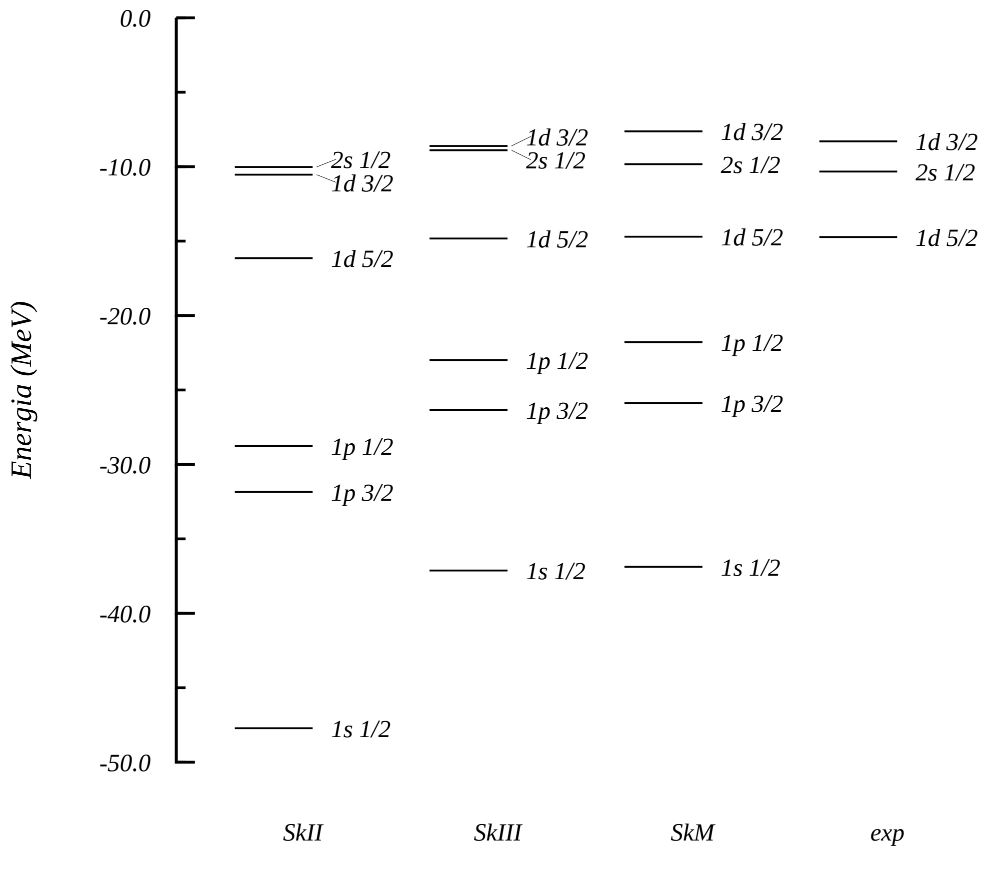


Figura 10: ^{40}Ca. Spettro energetico dei protoni.

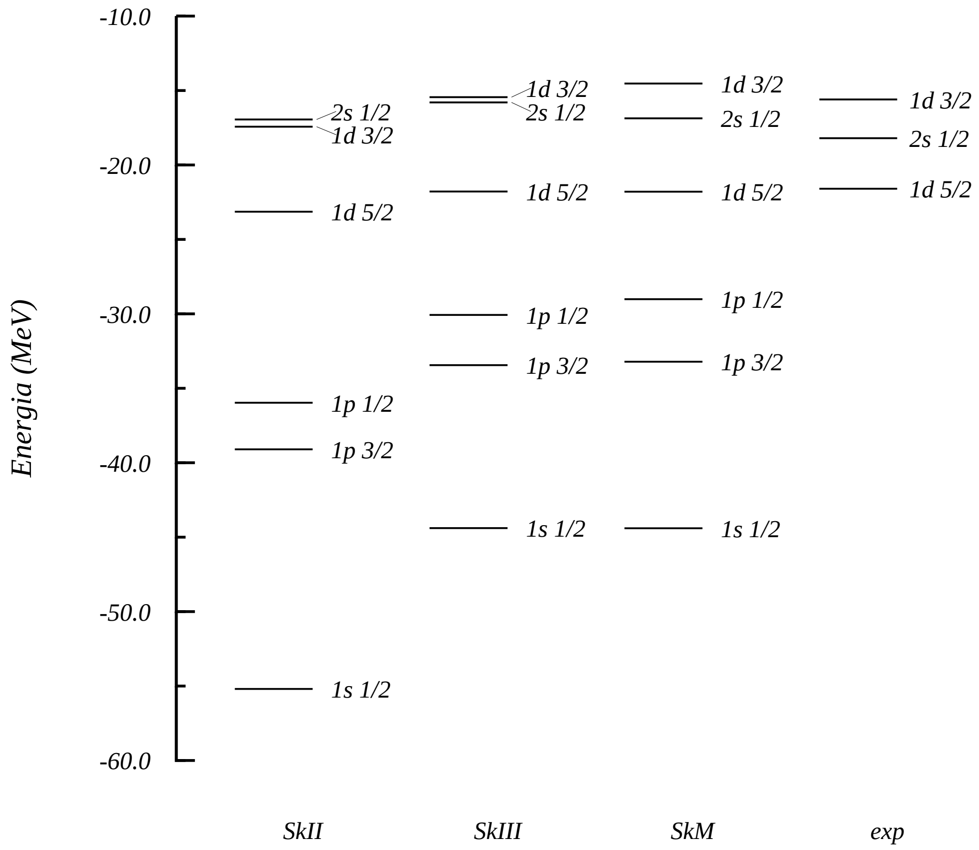


Figura 11: ^{40}Ca. Spettro energetico dei neutroni.

Il nucleo ^{48}Ca presenta asimmetria fra neutroni e protoni, pertanto i due spettri, fig.12 e fig.13, sono differenti.

Osservando lo spettro energetico dei protoni vediamo come SkII fornisce i valori più bassi e SkM quelli più elevati. Notiamo, inoltre, come per SkM i due livelli più esterni abbiano valori invertiti rispetto alle altre due parametrizzazioni, con 2s 1/2 più basso di 1d 3/2.

Lo spettro energetico dei neutroni presenta anche il livello 1f 7/2. I livelli energetici dati da SkIII sono più elevati rispetto a quelli dati da SkM a differenza di quanto avviene per i protoni. Per SkII il livello 2s 1/2 è ancora più alto rispetto a 1d 3/2 a differenza delle altre due parametrizzazioni.

Notiamo che gli spettri forniti da SkM e SkIII sono più compatti rispetto a quello fornito da SkII.

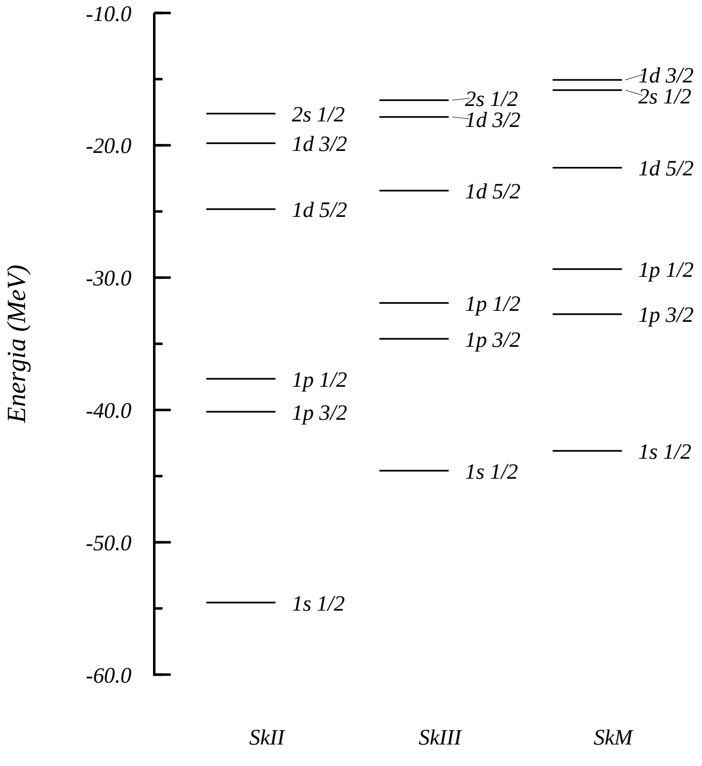


Figura 12: ^{48}Ca. Spettro energetico dei protoni.

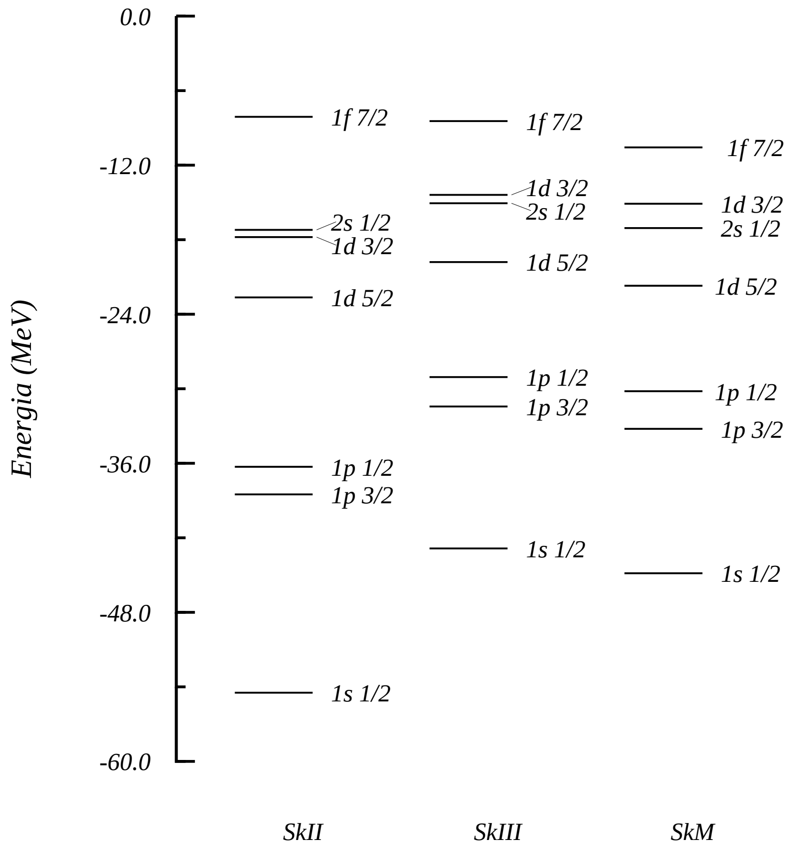


Figura 13: ^{48}Ca. Spettro energetico dei neutroni.

Anche nel caso del ^{208}Pb, fig. 14 e fig. 15, gli spettri di protoni e neutroni forniti da SkM e SkIII sono più compatti rispetto a quelli forniti da SkII.

La parametrizzazione SkII fornisce livelli energetici interni più bassi rispetto alle altre due parametrizzazioni.

Per lo spettro energetico dei protoni i valori dati da SkIII sono più bassi rispetto a quelli dati da SkM.

Nel caso dei neutroni, invece, SkM fornisce valori più bassi rispetto a SkIII.

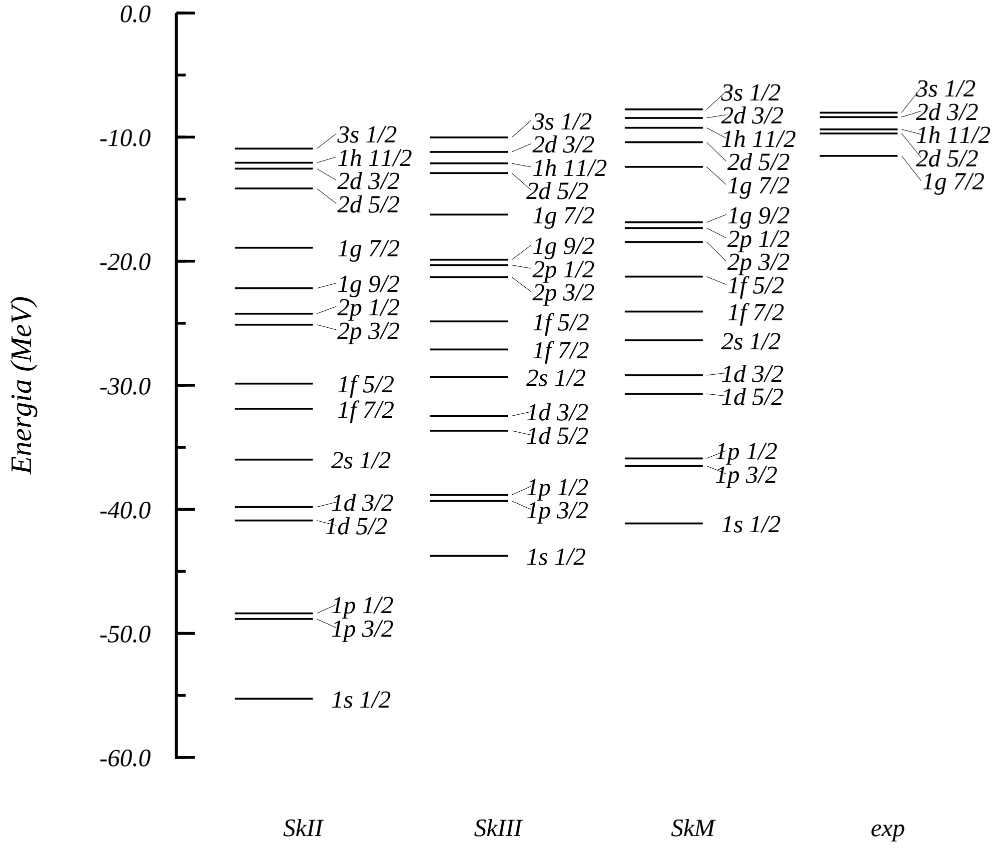


Figura 14: ^{208}Pb. Spettro energetico dei protoni.

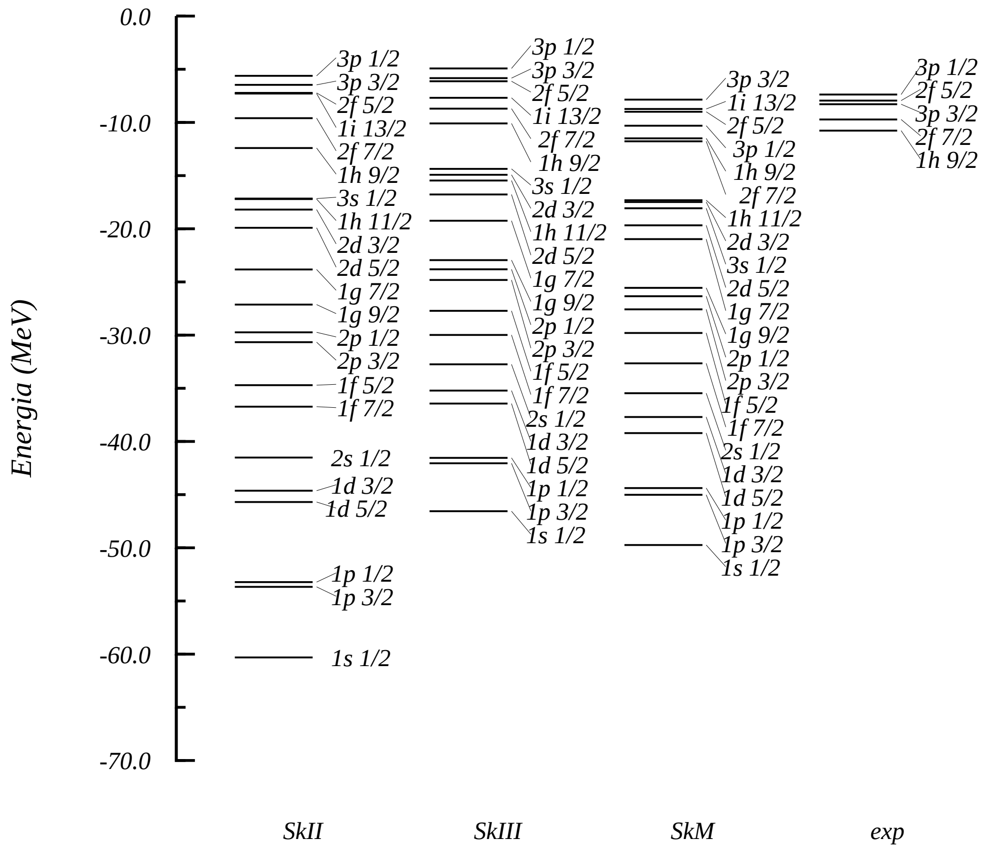


Figura 15: ^{208}Pb. Spettro energetico dei neutroni.

Osserviamo in fig.16 e fig.17 i livelli più esterni di tali spettri confrontati con i valori sperimentali [Spe78].

Nel caso dei protoni, la parametrizzazione SkM fornisce i valori più vicini a quelli sperimentali, in particolare per i livelli 1h 11/2 e 2d 3/2. I valori forniti dalle altre parametrizzazioni si discostano da quelli sperimentali. Inoltre nel caso di SkII il livello 1h 11/2 è più elevato rispetto a 2d 3/2 diversamente dai valori sperimentali.

Lo spettro energetico dei neutroni fornito dalla parametrizzazione SkM è quello che riproduce meglio i valori sperimentali; il livello 2f 7/2 è però più basso di 1h 9/2 a differenza dei valori sperimentali. SkIII fornisce uno spettro energetico più elevato, mentre SkII uno spettro meno compatto rispetto a quello sperimentale.

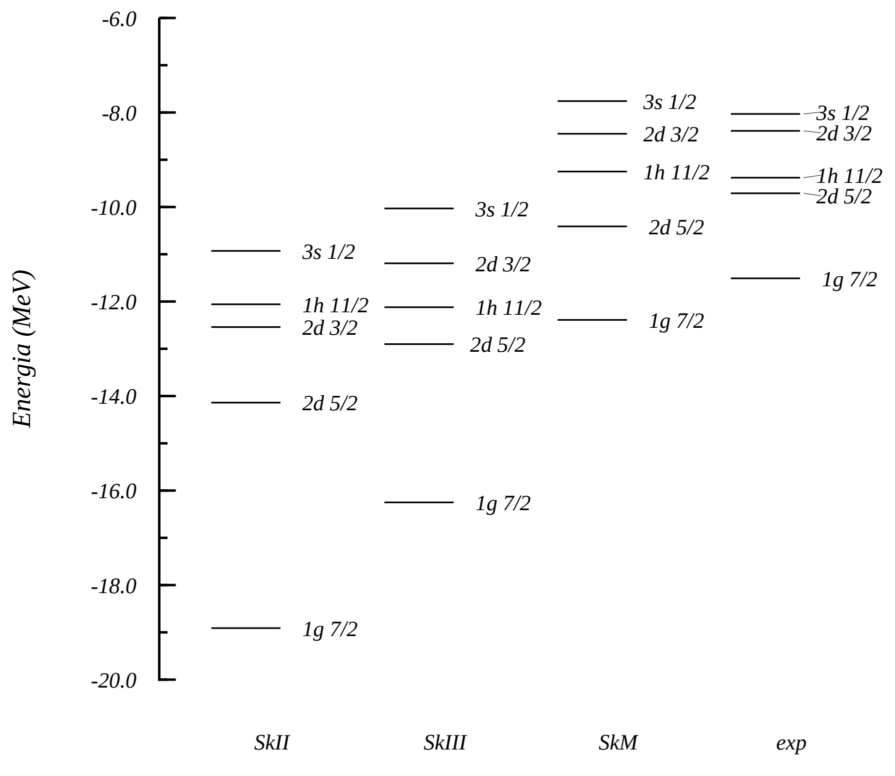


Figura 16: ^{208}Pb. Livelli esterni dello spettro energetico dei protoni.

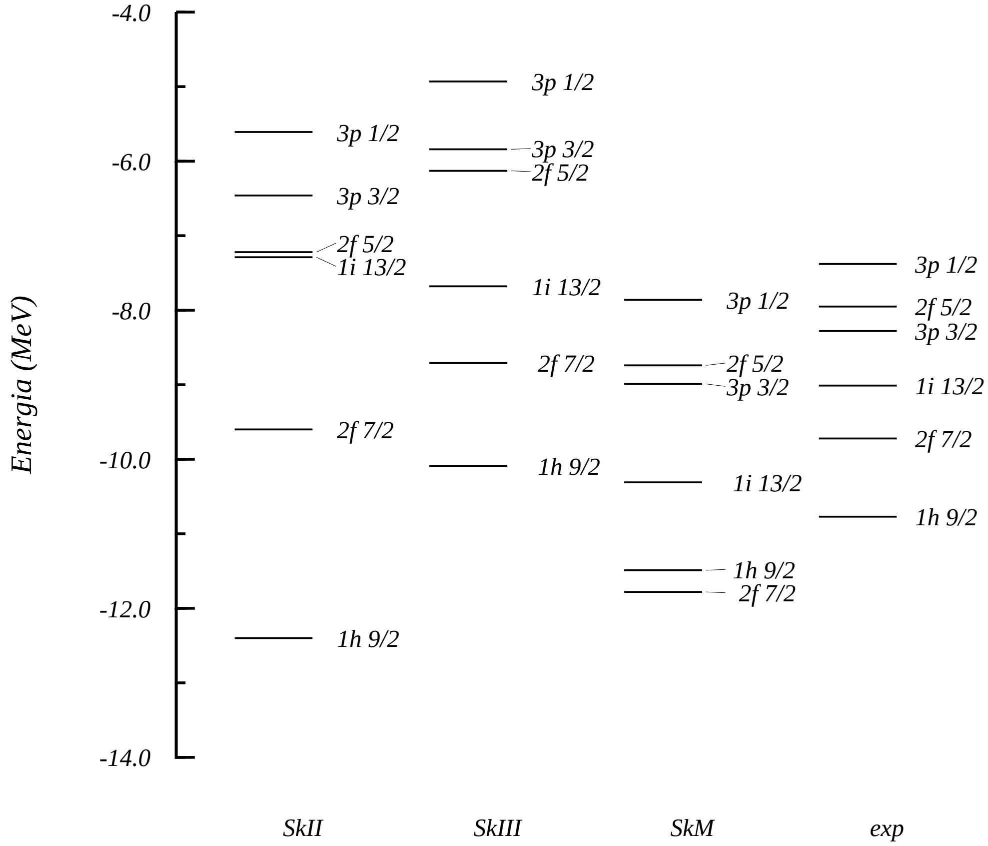


Figura 17: ^{208}Pb. Livelli esterni dello spettro energetico dei neutroni.

7 Interazione microscopica

L'interazione di Skyrme è un'interazione effettiva, i cui parametri sono fissati nei calcoli Hartree-Fock per riprodurre al meglio le proprietà dello stato fondamentale dei nuclei doppio magici.

In fisica nucleare le interazioni realistiche sono definite come quelle interazioni che riproducono le proprietà dei sistemi a due corpi. Considerando sistemi di due nucleoni si ipotizza che questi siano oggetti puntiformi privi di struttura interna.

Il più semplice stato legato di due nucleoni è il deutone, formato da un protone e un neutrone. Dagli esperimenti sul deutone si sono ricavate le seguenti proprietà relative allo stato fondamentale:

Energia di legame B = -2.225 MeV
Spin e parità $J^P = 1^+$
Isospin $I = 0$
Momento di dipolo magnetico $\mu = 0.857\ \mu_N$
Momento di quadrupolo elettrico $Q = 0.282\ efm^2$

Dato che il deutone ha spin 1 ed è l'unico stato legato di due nucleoni, l'interazione nucleone-nucleone dipende dallo spin; inoltre, non si osservano in natura stati legati neutrone-neutrone o protone-protone, per cui l'interazione dipende anche dall'isospin. Il deutone è costituito principalmente da uno stato s con $l = 0$, ma se esso fosse un puro stato l = 0, la funzione d'onda esibirebbe, allora, una simmetria sferica e quindi il momento di quadrupolo elettrico sarebbe nullo e il momento di dipolo magnetico sarebbe dato dalla somma dei momenti magnetici del protone e del neutrone. Si avrebbe così:

$$\mu_p + \mu_n = 2.792\mu_N - 1.913\mu_N = 0.879\mu_N \tag{66}$$

sensibilmente differente dal valore misurato pari a $0.857\mu_N$.

Le evidenze empiriche circa il momento di dipolo magnetico e il momento di quadrupolo elettrico possono essere spiegate mediante una miscela di stati s e d con gli stessi numeri quantici J^P:

$$|\psi_d\rangle = 0.98|^3S_1\rangle + 0.20|^3D_1\rangle \tag{67}$$

Questo effetto di mixing nello stato legato protone-neutrone porta all'introduzione di una componente tensoriale nell'espressione del potenziale nucleone-nucleone.

Inoltre si sono studiati sistemi a due corpi realizzando processi di diffusione elastica nucleone-nucleone. L'analisi degli sfasamenti permette di fissare quantitativamente l'interazione nucleone-nucleone.

In letteratura esistono varie parametrizzazioni di interazioni realistiche. I potenziali moderni riproducono circa 5000 dati con un χ^2 per dato circa pari all'unità [Wir94].

Abbiamo effettuato calcoli Hartree-Fock usando l'interazione V8' [Pie02], che utilizza solo i primi otto canali dell'interazione V18 [Wir94], riarrangiati per tenere conto del troncamento degli altri canali:

$$\begin{aligned} V(r) &= V_1(r) + \\ &+ V_2(r)\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 \\ &+ V_3(r)\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \\ &+ V_4(r)\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 \\ &+ V_5(r)S_{12} \\ &+ V_6(r)S_{12}\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 \\ &+ V_7(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \\ &+ V_8(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 \end{aligned} \tag{68}$$

dove r è la distanza relativa fra i due nucleoni.

L'andamento dei canali dell'interazione V8' in funzione della distanza relativa fra i due nucleoni è mostrato in fig.18.

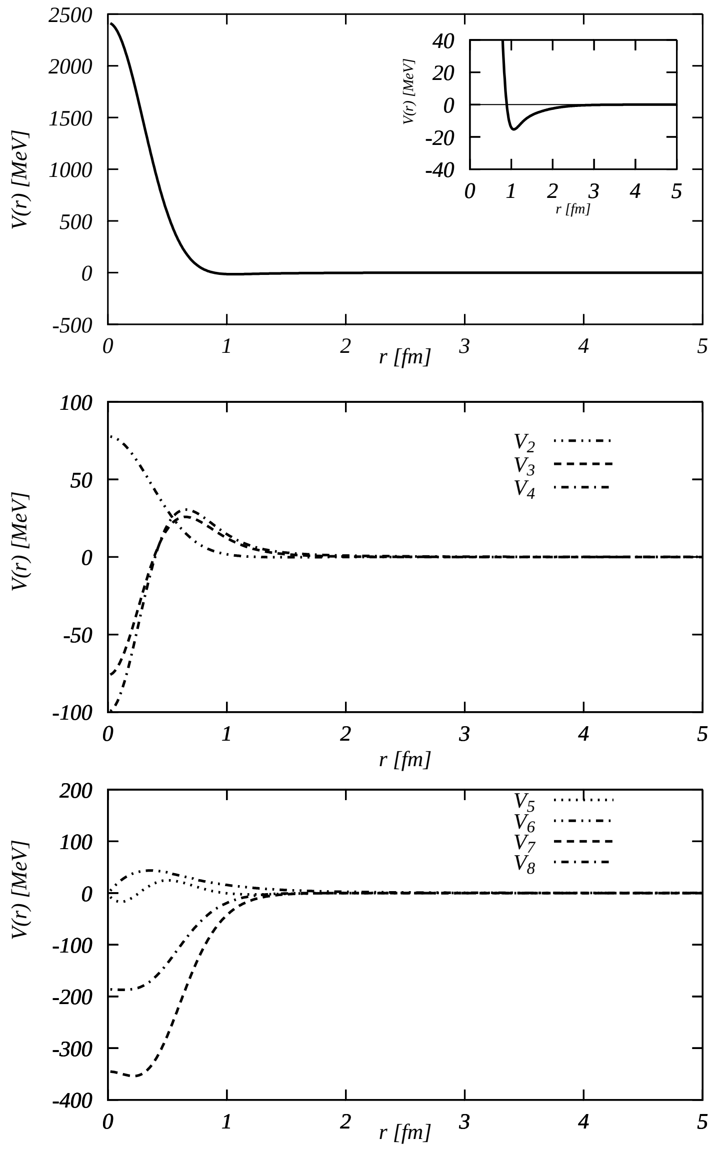


Figura 18: Il grafico in alto riporta l'andamento del canale centrale del potenziale V8' in funzione della distanza relativa fra due nucleoni. Al centro e in basso sono mostrati gli andamenti degli altri canali del potenziale.

I calcoli Hartree-Fock eseguiti utilizzando l'interazione V8' presentano problemi di convergenza.

Come mostrato in fig.19 per il nucleo ^{16}O l'energia di legame fornita dai calcoli ad ogni iterazione assume un valore diverso dal precedente; dopo un certo numero di iterazioni tale grandezza oscilla fra due valori definiti senza convergere.

Un modo per ovviare a tali problemi di convergenza è il metodo del rilassamento. Con questo metodo si riesce ad ottenere convergenza dopo un certo numero di iterazioni e si giunge ad un valore definito per l'energia di legame.

Come stima dell'energia di legame del nucleo ^{16}O si ottiene il valore -36.020 MeV, mentre le evidenze sperimentali forniscono il valore -127.68 MeV. Si ha quindi uno scarto relativo pari a 0.72.

Inoltre, come mostra fig.20, l'andamento della distribuzione di carica all'interno del nucleo si discosta profondamente dalla distribuzione di carica attesa e da quella fornita dai calcoli Hartree-Fock eseguiti con l'interazione di Skyrme.

Il raggio quadratico medio della distribuzione di carica è 21.64 fm, mentre l'interazione SkII fornisce il valore 2.7 fm. Ciò indica che i calcoli con l'interazione microscopica danno un nucleo molto più grande e meno compatto e denso di quanto mostrano le evidenze sperimentali.

Le distribuzioni di neutroni e di protoni ottenute con l'interazione V8' confermano la mancanza di accordo con i risultati ottenuti con l'interazione di Skyrme.

Anche per gli altri nuclei si riscontra il problema della convergenza, come mostra fig.19 per il ^{12}C; a differenza del ^{16}O in tale caso non si arriva a convergenza neanche con il metodo del rilassamento.

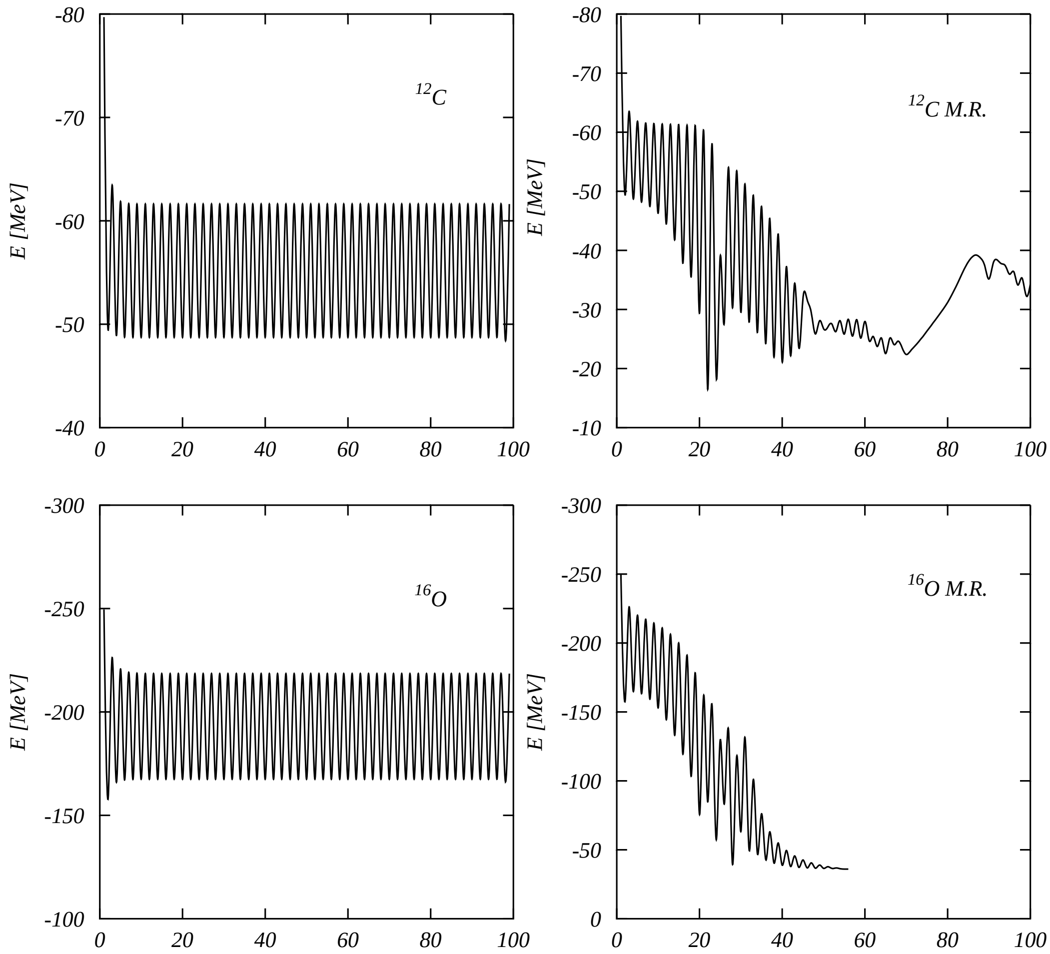
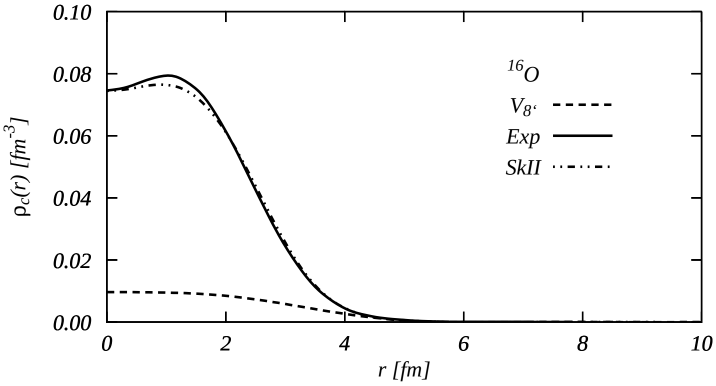
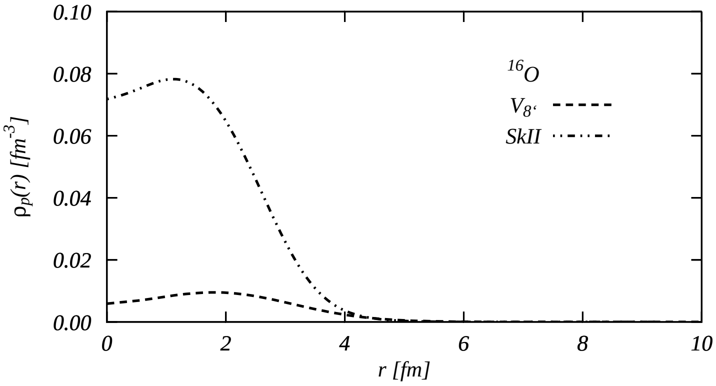


Figura 19: I grafici mostrano l'andamento dell'energia di legame fornita in output nelle iterazioni dei calcoli Hartree-Fock con il potenziale V8'. Abbiamo unito i punti con una linea continua per rendere meglio l'idea delle oscillazioni e della convergenza. Nel caso ^{16}O, a differenza del ^{12}C, il metodo del rilassamento porta a convergenza.





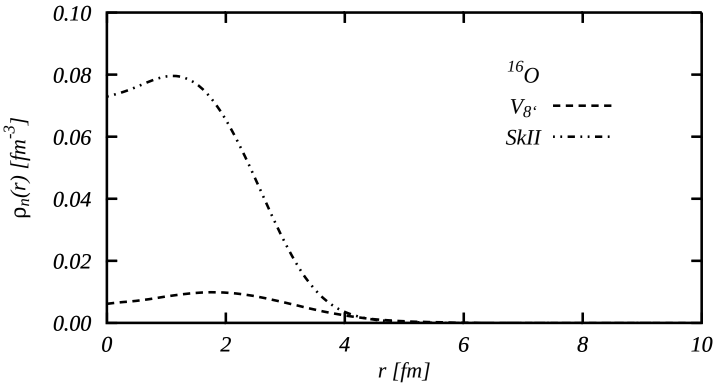


Figura 20: Il grafico in alto mostra il confronto fra l'andamento della distribuzione di carica ottenuta con i calcoli Hartree-Fock con l'interazione V8', con l'interazione SkII e quella sperimentale; i grafici al centro e in basso mostrano rispettivamente il confronto fra l'andamento della distribuzione di protoni e di neutroni ottenute con i calcoli Hartree-Fock con l'interazione V8' e con la SkII per il nucleo ^{16}O.

8 Conclusioni

La teoria Hartree-Fock presentata costituisce una base microscopica del modello a campo medio o a particelle indipendenti.

Come visto, l'ipotesi che la funzione d'onda che descrive il nucleo sia un determinante di Slater di funzioni d'onda di singoli nucleoni, implica l'approssimazione di campo medio, ovvero si considera l'hamiltoniana del nucleo come somma delle hamiltoniane dei singoli nucleoni trascurando V_{res}.

Abbiamo applicato tale teoria nei calcoli Hartree-Fock per studiare le proprietà dei nuclei doppio magici.

Abbiamo utilizzato nei calcoli interazioni effettive, in particolare l'interazione di Skyrme, fissate per riprodurre osservabili, nel nostro caso densità di carica e energia di legame dei nuclei.

I risultati ottenuti, compatibili con le evidenze sperimentali mostrano come effettivamente le interazioni effettive riproducano bene le proprietà dei nuclei: energia di legame, densità di carica, spettri energetici dei protoni e dei neutroni.

Abbiamo, inoltre, verificato come non sia possibile utilizzare interazioni microscopiche in tali calcoli, dato che la presenza di un core fortemente repulsivo rende instabile la soluzione Hartree-Fock.

L'uso di interazioni microscopiche è possibile solo in teorie a molticorpi che non fanno approssimazioni di campo medio [Pie02], [Fab00].

Nel caso della teoria Hartree-Fock gli effetti a molticorpi provocati da V_{res} sono considerati in modo effettivo nella parametrizzazione dell'interazione.

Riferimenti bibliografici

[Aud93] G. Audi e A.H. Wapstra, Nucl. Phys. **A565**, 1, 1993.

[Bei75] M. Beiner et al., Nucl. Phys. **A238**, 29, 1975.

[Co84] G. Co', Ph.D. Thesis, Università di Bonn, 1984, KFA-int.rep 1931 (Non pubblicata).

[Co87] G. Co' et al., Nucl. Phys. **A469**, 684, 1987.

[deV87] H. de Vries, C.W. de Jager e C. de Vries, At. Data and Nucl. Data Tables **36**, 360, 1987.

[Edm57] A.R. Edmonds, Angular momentum in quantum mechanics, Princeton University Press, 1957.

[Fab00] A. Fabrocini, F. Arias de Saavedra e G. Co', Phys. Rev. **C61**, 044302, 2000.

[Kri80] H. Krivine, J. Treiner e O. Bohigas, Nucl. Phys. **A336**, 155, 1980.

[Pie02] S. Pieper, K. Varga e R.B. Wiringa, Phys. Rev. **C66**, 044310, 2002.

[Rei91] P.G. Reinhard, cap.2 in Computational Nuclear Physics, K. Langanke, J.A. Maruhn e S.E. Koonin (eds), Springer Verlag, Berlino, 1991.

[Rin80] P. Ring e P. Schuck, The nuclear many-body problem, Springer Verlag, 1980.

[Row70] D.J. Rowe, Nuclear collettive motion: models and theory, Methuen and Co.Ltd, 1970.

[Sky59] T.H.R. Skyrme, Nucl. Phys. **9**, 615, 1959.

[Spe78] G. Rinker e J. Specth, Nucl. Phys. **A306**, 360, 1978.

[Vau72] D. Vautherin e D.M. Brink, Phys. Rev. **C5**, 626, 1972.

[Wir94] R.B. Wiringa, V.G.J. Stoks e R. Schiavilla, Phys. Rev. **C51**, 38, 1994.