

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Dipartimento di Fisica e Astronomia
Corso di Laurea in Fisica

Modello di Skyrme-Hartree-Fock

Relatore:
Dott. Paolo Finelli

Presentata da:
Luca Moretti

Anno Accademico 2015/2016

Indice

1	Introduzione	2
2	Equazioni di Hartree-Fock	3
2.1	Il metodo variazionale	3
2.2	Equazioni di Hartree-Fock dal metodo variazionale	4
3	Interazione effettiva di Skyrme	8
3.1	Termine centrale	10
3.2	Termine dipendente dalla densità	10
3.3	Termine dipendente dal momento	11
3.4	Termine di spin-orbita	12
3.5	Termine tensoriale	14
4	Simulazione con Sky3D	18
4.1	Deformazione del nucleo	22
4.2	Simulazione dello stato fondamentale con Skyrme-Hartree-Fock	23
4.2.1	Ossigeno $^{16}_8O$	25
4.2.2	Calcio $^{40}_{20}Ca$	28
4.2.3	Nichel $^{56}_{28}Ni$	31
4.2.4	Stagno $^{100}_{50}Sn$	34
4.2.5	Piombo $^{208}_{82}Pb$	37
4.3	Simulazione di collisioni con Skyrme-Hartree-Fock	40
4.3.1	Collisione $^{16}_8O + ^{16}_8O$	42
5	Conclusioni	48
A	Appendice: densità	49
B	Appendice: file di input static	50
C	Appendice: file di input dynamic	51
D	Appendice: metodo predictor-corrector	52

1 Introduzione

Il modello di Hartree-Fock si inserisce nella categoria di quelli che sono chiamati modelli di campo medio. In tali approcci si approssima la totalità delle interazioni agenti su una particella in un "potenziale medio", nel quale essa si muove indipendentemente dagli altri costituenti del sistema. Una caratteristica importante del "campo medio" è l'autoconsistenza; poiché ogni particella contribuisce ad un potenziale medio per ciascun'altra, per risolvere il sistema occorre determinare le funzioni d'onda di ciascuna che siano compatibili simultaneamente con tutte le altre. Determinato il potenziale medio, invece di risolvere il problema a N corpi, si può, equivalentemente, studiare le singole particelle sulle quali agisce un unico potenziale. Sostituendo così il problema a N corpi con quello di una particella immersa in un potenziale ad un corpo. Il modello di Hartree-Fock si può applicare con successo per lo studio dei solidi, degli elettroni in un atomo, o anche per analizzare il comportamento dei nucleoni nei nuclei. Spesso, però, tale metodo è usato come punto di partenza per poi poter applicare altri metodi, come quello perturbativo. Nel caso dello studio di nuclei atomici, si ha un sistema molto correlato ed il potenziale medio emerge dalle singole interazioni nucleone-nucleone. Con l'aumentare del numero di costituenti del nucleo, cresce, ancor più rapidamente, la quantità di calcoli da eseguire per risolvere il sistema. Ciò porta alla necessità di applicare approssimazioni che riducano la mole di calcolo, ma che non alterino le caratteristiche fisiche dell'oggetto in studio. Inizialmente Hartree sviluppò, partendo da considerazioni intuitive e dal principio di autoconsistenza, un metodo iterativo per determinare le funzioni d'onda di elettroni in atomi andando a risolvere l'equazione di Schrödinger. Successivamente Fock e Slater migliorarono il metodo cambiando le funzioni d'onda in modo da soddisfare il principio di esclusione di Pauli. Tali funzioni d'onda sono ottenute da un prodotto antisimmetrico, generalizzato in quello che è il determinante di Slater.

In questo elaborato ci si occuperà al capitolo 2 delle equazioni di Hartree-Fock. Partendo dal principio variazionale di Ritz, fino ad ottenere l'equazioni desiderate.

Nel capitolo 3, invece, si approfondirà l'interazione effettiva di Skyrme, che verrà poi incorporata nel metodo di Hartree-Fock (capitolo 4) al fine delle simulazioni svolte con il codice Sky3D.

In ultimo si lascia un capitolo per considerazioni finali.

2 Equazioni di Hartree-Fock

2.1 Il metodo variazionale

Con il metodo variazionale ci si propone di risolvere, in maniera approssimata, il problema agli autovalori dell'equazione di Schrödinger

$$\hat{H} |\phi\rangle = E |\phi\rangle . \quad (1)$$

Tale metodo è utile per sistemi molto correlati, in cui non è possibile dividere l'hamiltoniana in due contributi, con ordine di grandezza significativamente diverso, per poter applicare la teoria perturbativa. Alcuni esempi di metodi sviluppati a partire da quello variazionale sono il metodo di Hartree-Fock, ma anche la teoria della superconduttività di Bardeen-Cooper-Schrieffer, o la teoria atomica di Thomas-Fermi. In seguito ci si concentrerà principalmente sul metodo di Hartree-Fock, oggetto di questo studio. Per riferimenti si veda [1]. Il punto di partenza del metodo variazionale è quello di definire un certo funzionale, il cui estremo è la soluzione del problema agli autovalori (1), mediante

$$\delta E[\phi] = 0 . \quad (2)$$

Determinato il $\bar{\phi}$ che soddisfa l'equazione (2), allora $\bar{\phi}$ è soluzione dell'equazione di Schrödinger. In particolare $\bar{\phi}$ corrisponde ad un punto estremante, di minimo, massimo o di sella, del funzionale $E[\phi]$. Si definisce ora il funzionale

$$E[\phi] = \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} , \quad (3)$$

e applicando la variazione al precedente funzionale otteniamo

$$\begin{aligned} \delta E[\phi] &= \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left(\langle \delta \phi | \hat{H} | \phi \rangle + \langle \phi | \hat{H} | \delta \phi \rangle \right) - \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle^2} (\langle \delta \phi | \phi \rangle + \langle \phi | \delta \phi \rangle) \\ &= \frac{1}{\langle \phi | \phi \rangle} \left[\langle \delta \phi | \left(\hat{H} | \phi \rangle - \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} | \phi \rangle \right) + \left(\langle \phi | \hat{H} - \langle \phi | \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right) | \delta \phi \rangle \right] \\ &= \frac{2}{\langle \phi | \phi \rangle} \text{Re} \left[\langle \delta \phi | \left(\hat{H} | \phi \rangle - E[\phi] | \phi \rangle \right) \right] = 0 . \end{aligned}$$

Poiché $|\delta \phi\rangle$ è arbitraria e può essere sostituita anche con $|\delta \phi\rangle i$, ciò conduce all'equazione non lineare

$$\hat{H} |\phi\rangle - E[\phi] |\phi\rangle = 0 . \quad (4)$$

Di conseguenza risolvere il problema agli autovalori equivale a determinare il $\bar{\phi}$ critico del funzionale (3).

Dal principio variazionale di Ritz si ha che la $\bar{\phi}$ che fornisce il valore più piccolo possibile dell'energia (più vicino a E_0) è la funzione che meglio approssima la funzione d'onda del mio sistema nello stato fondamentale ϕ_0 , poiché, presa una qualsiasi funzione d'onda di prova ϕ , otteniamo

$$E[\phi] \geq E_0 .$$

Per spiegare ciò, supponiamo di espandere la funzione d'onda di prova nella base delle autofunzioni dell'hamiltoniana

$$|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n |\phi_n\rangle .$$

Essendo le ϕ_n autofunzioni di \hat{H} , continua a valere la relazione $\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$ e possiamo quindi scrivere l'energia come

$$E[\phi] = \frac{\sum_{nn'} a_n^* a_{n'} E_n \delta_{nn'}}{\sum_n |a_n|^2} \geq \frac{\sum_n |a_n|^2 E_0}{\sum_n |a_n|^2} = E_0 . \quad (5)$$

Dove vale l'uguaglianza se tutti i coefficienti a_n con $n \neq 0$ sono nulli, che equivale a ϕ proporzionale a ϕ_0 .

2.2 Equazioni di Hartree-Fock dal metodo variazionale

Come detto nell'introduzione, con il metodo di Hartree-Fock ci si propone di ridurre la totalità di termini d'interazione a due corpi in un potenziale di singola particella. Scrivendo l'hamiltoniana non più come

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N v(x_i, x_j) , \quad (6)$$

ma piuttosto in termini di un operatore di singola particella

$$\hat{H}_{HF} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_{HF(i)} = \sum_{i=1}^N (\hat{t}_i + \hat{v}_{HF(i)}) . \quad (7)$$

L'equazione (7) è un'approssimazione della (6) tanto migliore quanto meglio il potenziale di Hartree-Fock minimizza quella parte di interazione residua che rimane passando ad una trattazione di campo medio. Ovvero, partendo dall'equazione (6) si somma e si sottrae il potenziale di campo medio, ottenendo

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \hat{v}_{HF(i)} \right) + \sum_{i \neq j}^N \left(\frac{1}{2} v(x_i, x_j) - \hat{v}_{HF(i)} \right) .$$

Il termine con la prima sommatoria è l'hamiltoniana di Hartree-Fock, mentre la seconda sommatoria rappresenta quella che è l'interazione residua. Come già detto, migliore sarà l'approssimazione del campo medio, minore sarà il peso dell'interazione residua nell'hamiltoniana totale. Per ulteriori approfondimenti sull'interazione residua si veda [2]. Una volta applicato il metodo di Hartree-Fock si potrà poi migliorare i calcoli ottenuti riprendendo la parte di interazione residua trascurata e analizzando perturbativamente il sistema.

Tuttavia il potenziale \hat{v}_{HF} non è conosciuto a priori. Lo scopo è risolvere il problema agli autovalori

$$\hat{H}_{HF}\Phi = E\Phi$$

dove la soluzione è un determinante di Slater

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_1(x_2) & \cdots \\ \phi_2(x_1) & \ddots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \phi_i(x_j) \end{vmatrix}. \quad (8)$$

È qui che entra in gioco il principio variazionale. Siccome non si conosce neanche il potenziale di Hartree-Fock, è necessario fare un ansatz della funzione d'onda, ottimizzandolo in modo che soddisfi il principio variazionale. Perciò, partendo dall'equazione (4), e minimizzandola rispetto agli orbitali di singola particella, si ottiene

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta\phi_\alpha^*(x)} \left[\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle - E \langle\phi|\phi\rangle \right] &= 0, \\ \frac{\delta}{\delta\phi_\alpha^*(x)} \left[\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle - \sum_{i=1}^N \epsilon_i \int dy \phi_i(y) \phi_i^*(y) \right] &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Si calcola ora il valore d'aspettazione di \hat{H} , in cui si è aggiunto un potenziale di singola particella $u(y)$. È da tenere presente che tale potenziale è necessario per lo studio degli elettroni nell'atomo, ma inesistente per un sistema di nucleoni.

$$\begin{aligned} \langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle &= \sum_{i=1}^N \int dy \phi_i^*(y) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + u(y) \right] \phi_i(y) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \int \int dy dy' \phi_i^*(y) \phi_j^*(y') v(y, y') \phi_i(y) \phi_j(y') \\ &- \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \int \int dy dy' \phi_i^*(y) \phi_j^*(y') v(y, y') \phi_j(y') \phi_i(y), \end{aligned}$$

in cui le ultime due sommatorie sono, rispettivamente, i termini diretto e di scambio. Andando a sviluppare l'equazione (9) con il valore d'aspettazione di \hat{H} , appena determinato, si ottiene

$$\begin{aligned}
0 = & \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + u(x) \right] \phi_\alpha(x) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \int dy' \phi_j^*(y') v(x, y') \phi_\alpha(x) \phi_j(y') \\
& + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \int dy \phi_i^*(y) v(y, x) \phi_i(y) \phi_\alpha(x) \\
& - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \int dy' \phi_j^*(y') v(x, y') \phi_j(x) \phi_\alpha(y') \\
& - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \int dy \phi_i^*(y) v(y, x) \phi_\alpha(y) \phi_i(x) - \epsilon_\alpha \phi_\alpha(x) .
\end{aligned}$$

Nella quale, sommando il secondo con il terzo termine ed il quarto con il quinto, si ottiene l'equazione di Hartree-Fock nello spazio delle coordinate radiali, come in [3],

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + u(x) + \int dy \rho(y) v(y, x) \right] \phi_\alpha(x) - \int dy \rho(x, y) v(x, y) \phi_\alpha(x) = \epsilon_\alpha \phi_\alpha(x) . \quad (10)$$

In quest'ultima equazione si è usata la rappresentazione per la densità e la matrice di densità per determinanti di Slater

$$\begin{aligned}
\rho(y) &= \sum_{i=1}^N \phi_i^*(y) \phi_i(y) , \\
\rho(x, y) &= \sum_{i=1}^N \phi_i^*(y) \phi_i(x) .
\end{aligned}$$

Lo scopo iniziale, equazione (7), era quello di riassumere la maggior parte delle interazioni in un unico potenziale di singola particella. È ciò che abbiamo ottenuto nella (10), in cui possiamo pensare il secondo, terzo e quarto termine come un unico potenziale

$$\hat{V}_{HF} \phi_i = u(x) \phi_i(x) + \int dy \rho(y) v(x, y) \phi_i(x) - \int dy \rho(x, y) v(x, y) \phi_i(y) . \quad (11)$$

Il potenziale di singola particella, $u(x)$, è nullo nel caso dello studio di uno stato legato di nucleoni.

In particolare il termine

$$U(x) = \int dy \rho(y) v(x, y) , \quad (12)$$

è chiamato potenziale di Hartree o diretto, mentre,

$$W(x, y) = \rho(x, y)v(x, y) , \quad (13)$$

è il potenziale di Fock o di scambio.

Si può notare come l'equazione di Hartree-Fock assomigli molto alla consueta equazione di Schrödinger, ma con un termine non locale aggiuntivo.

Le incognite del problema che vogliamo risolvere con il metodo di Hartree-Fock sono sia le funzioni d'onda di singola particella, sia il potenziale medio. Tuttavia, data la non linearità dell'equazione, per poter determinare le funzioni d'onda bisogna conoscere il potenziale e viceversa. Dunque per risolvere il sistema di equazioni integro-differenziali si ricorre ad un metodo iterativo. Si parte da una funzione d'onda iniziale che si presuppone non si discosti molto dalla vera funzione d'onda che si cerca. Un esempio può essere, nel problema degli atomi a molti elettroni, le funzioni d'onda idrogenoidi. Scelta la funzione d'onda iniziale, che chiameremo "di approssimazione zero", ϕ_i^0 , si inserisce nell'equazione (11) per determinare, in prima approssimazione, il potenziale, V_{HF}^0 . Successivamente si utilizza V_{HF}^0 , inserito nell'equazione (10), per determinare la seconda approssimazione della funzione d'onda, ϕ_i^1 .

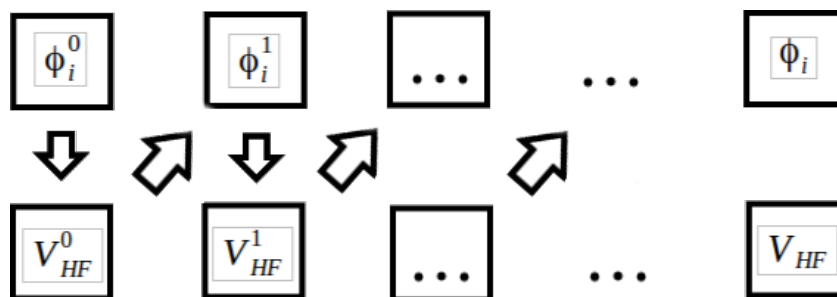


Figura 1: Schema iterativo per la risoluzione dell'equazione di Hartree-Fock

Si presuppone che dopo un certo numero d'iterazioni il procedimento converga. Per ottenere ciò si deve avere che, dopo molte iterazioni, la funzione d'onda allo stato precedente (n) differisca da quella successiva ($n+1$) entro una tolleranza relativamente piccola. La convergenza del metodo non dipende fortemente dalla funzione d'onda di prima approssimazione. Tuttavia, ovviamente, si sceglieranno condizioni che riproducano un sistema fisico legato. Migliore è la condizione iniziale ϕ_i^0 , meno iterazioni saranno necessarie per raggiungere la convergenza.

In conclusione il metodo di Hartree-Fock soddisfa il principio di esclusione di Pauli, dal momento che il determinante di Slater è antisimmetrico per definizione.

3 Interazione effettiva di Skyrme

Il metodo più comunemente usato per descrivere l'interazione tra nucleoni all'interno di un nucleo è l'interazione effettiva di Skyrme. In tale ambito è importante il lavoro di Vautherin e Brink (vedi, [4], ma anche gli studi [5], [6] e [7]). Il punto di partenza per lo sviluppo di questo modello è quello di poter esprimere il funzionale dell'energia in termini di una espansione a contatto, in cui il termine di scambio abbia la stessa struttura operatoriale di quello diretto. Questo sviluppo aiuta a ridurre il numero di integrazioni necessarie per risolvere l'equazioni determinanti gli stati di singola particella.

Delle condizioni che si richiedono, inoltre, sono l'invarianza per parità, invarianza per rotazioni spaziali e di isospin e l'invarianza per inversione spaziale. Per rendere più evidenti la soddisfazione di queste ipotesi si riscrive l'energia in funzione di densità locali, descritte in appendice A, di cui tre pari rispetto all'inversione temporale e quattro dispari. Dai vari studi eseguiti con il modello di Skyrme-Hartree-Fock si sono spesso privilegiati i nuclei pari-pari, poiché per i calcoli con questi le densità dispari rispetto al tempo si annullano. Per questo motivo sono più studiate le proprietà dei nuclei pari-pari piuttosto che quelle dei nuclei dispari-dispari.

Nel modello di Skyrme-Hartree-Fock l'energia è costituita da tre termini principali

$$E = E_{cinet} + E_{Coul} + \int \varepsilon_{Sky} d\mathbf{r} . \quad (14)$$

I primi due sono le componenti dell'energia cinetica e dell'interazione di Coulomb tra i protoni. Il termine di Coulomb è costituito da una componente diretta ed una di scambio, in cui si è approssimata, per semplicità, la densità di carica del nucleo alla densità dei protoni $\rho_p(r)$. Il termine diretto è:

$$E_{Coul}^{dir} = \frac{e^2}{2} \int \int \frac{\rho_p(\mathbf{r})\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' , \quad (15)$$

mentre quello di scambio è:

$$E_{Coul}^{ex} = -\frac{3}{4}e^2 \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \int \rho_p(\mathbf{r})^{4/3} d\mathbf{r} . \quad (16)$$

Per quanto riguarda l'energia cinetica, si scrive, come al solito

$$E_{cinet} = \frac{\hbar}{2m} \int \tau d\mathbf{r} ,$$

in cui τ rappresenta la densità cinetica, scritta come

$$\tau(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \nabla' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} .$$

Invece il termine dell'energia $\int \varepsilon_{Sky} dr$ è ottenuto partendo da un potenziale necessario per modellizzare l'interazione tra i nucleoni nel nucleo

$$\begin{aligned}
V_{Sky}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & t_0(1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \delta_{12} \\
& + \frac{t_1}{2} \left(1 + x_1 \hat{P}_\sigma\right) [\mathbf{k}'^2 \delta_{12} + \delta_{12} \mathbf{k}^2] \\
& + t_2 \left(1 + x_2 \hat{P}_\sigma\right) \mathbf{k}' \delta_{12} \mathbf{k} \\
& + \frac{t_3}{6} \left(1 + x_3 \hat{P}_\sigma\right) \rho \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}\right)^\alpha \delta_{12} \\
& + iW_0 \mathbf{k}' \delta_{12} (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) \times \mathbf{k} \\
& + \frac{t_e}{2} \left([3(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k}')(\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}') - (\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) \mathbf{k}'^2] \delta_{12} \right. \\
& \left. + \delta_{12} [3(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k})(\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}) - (\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) \mathbf{k}^2] \right) \\
& + t_o [3(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k}') \delta_{12} (\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}) - (\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) \mathbf{k}' \delta_{12} \mathbf{k}] .
\end{aligned} \tag{17}$$

Nel quale la delta di Dirac è definita come segue

$$\delta_{12} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) ,$$

e i rispettivi operatori momento sono, nel sistema del centro di massa,

$$\mathbf{k} = -\frac{i}{2} (\nabla_1 - \nabla_2) , \tag{18}$$

$$\mathbf{k}' = -\frac{i}{2} (\nabla'_1 - \nabla'_2) , \tag{19}$$

\hat{P}_σ è l'operatore di scambio di spin

$$\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) . \tag{20}$$

Per quanto riguarda W_0 , α , t_o , t_0 , t_1 , t_2 , t_3 , t_e , x_0 , x_1 , x_2 e x_3 , sono parametri liberi che si ottengono mediante una procedura di minimizzazione del χ^2 dai dati sperimentali. In letteratura sono proposti vari set di parametri, tuttavia non è lo scopo di questo lavoro investigare le differenze tra le varie classi di parametri. Nonostante il programma Sky3D offri la possibilità di scegliere quali parametri usare, non ci si soffermerà molto su questo aspetto.

Scritto dunque il potenziale di Skyrme, si ottiene il termine dell'energia integrando

$$\begin{aligned}
E_{Sky} = & \frac{1}{2} \sum_{i,j}^A \int \phi_i^*(\mathbf{r}'_1) \phi_j^*(\mathbf{r}'_2) V_{Sky}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) (1 - \hat{P}_M \hat{P}_\sigma \hat{P}_q) \\
& \times \phi_i(\mathbf{r}_1) \phi_j(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 |_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}'_1=\mathbf{r}_2=\mathbf{r}'_2} .
\end{aligned} \tag{21}$$

Nell'equazione (21) \hat{P}_M è l'operatore di Majorana, corrispondente allo scambio di posizione, e vale 1 se la potenza dell'operatore momento \mathbf{k} è pari, -1 altrimenti. \hat{P}_σ è l'operatore di scambio di spin, già descritto alla formula (20). Invece \hat{P}_q è l'operatore di scambio di isospin e vale

$$\hat{P}_q = \delta_{q_1 q_2} ,$$

con $q = +\frac{1}{2}$ per i protoni e $q = -\frac{1}{2}$ per i neutroni.

3.1 Termine centrale

Per valutare l'integrale della formula (21), si considera uno alla volta i vari termini del potenziale. Il primo è quello proporzionale a t_0 , chiamato anche termine centrale. Poiché in questo termine non compare l'operatore \mathbf{k} , il valore di \hat{P}_M è uguale a 1. La seguente espressione viene valutata

$$(1 + x_0 \hat{P}_\sigma)(1 - \hat{P}_M \hat{P}_\sigma \hat{P}_q) = \left(1 - \frac{1}{2} x_0\right) - \delta_{q_1 q_2} (x_0 + 1) + \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) (x_0 - \delta_{q_1 q_2}) .$$

Inserendo l'ultima uguaglianza nella (21)

$$E_{Sky}^{t_0} = \frac{t_0}{2} \sum_{i,j}^A \int \phi_i^*(\mathbf{r}'_1) \phi_j^*(\mathbf{r}'_2) \left[\left(1 - \frac{1}{2} x_0\right) - \delta_{q_1 q_2} (x_0 + 1) + \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) (x_0 - \delta_{q_1 q_2}) \right] \\ \times \phi_i(\mathbf{r}_1) \phi_j(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 \Big|_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}'_1=\mathbf{r}_2=\mathbf{r}'_2} .$$

Utilizzando le densità descritte in appendice A, si riscrive l'energia del termine centrale

$$E_{Sky}^{t_0} = \int \left\{ \frac{t_0}{2} \left[\left(1 + \frac{1}{2} x_0\right) \rho(\mathbf{r})^2 - \left(x_0 + \frac{1}{2}\right) \sum_q \rho_q(\mathbf{r})^2 \right] \right. \\ \left. + \frac{t_0}{4} \left[x_0 \mathbf{S}(\mathbf{r})^2 - \sum_q \mathbf{S}_q(\mathbf{r})^2 \right] \right\} d\mathbf{r} . \quad (22)$$

3.2 Termine dipendente dalla densità

Il termine dipendente dal parametro t_3 è formalmente uguale al termine centrale, l'unica differenza è la dipendenza dalla densità $\rho(\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2}{2})^\alpha$. Quindi, saltando alcuni passaggi, poiché identici ai precedenti, si ottiene la componente dell'energia dipendente da t_3

$$E_{Sky}^{t_3} = \int \left\{ \frac{t_3}{12} \left[\left(1 + \frac{1}{2} x_3\right) \rho(\mathbf{r})^{\alpha+2} - \left(x_3 + \frac{1}{2}\right) \rho(\mathbf{r})^\alpha \sum_q \rho_q(\mathbf{r})^2 \right] \right. \\ \left. + \frac{t_3}{24} \left[x_3 \rho(\mathbf{r})^\alpha \mathbf{S}(\mathbf{r})^2 - \rho(\mathbf{r})^\alpha \sum_q \mathbf{S}_q(\mathbf{r})^2 \right] \right\} d\mathbf{r} . \quad (23)$$

3.3 Termine dipendente dal momento

I termini dipendenti dal momento \mathbf{k} sono due, uno proporzionale a t_1 ed un altro proporzionale a t_2 .

Si analizza prima il termine con t_1 .

Le potenze di \mathbf{k} sono uguali a 2, cioè pari, ne consegue che \hat{P}_M è uguale a 1

$$(1 + x_1 \hat{P}_\sigma)(1 - \hat{P}_M \hat{P}_\sigma \hat{P}_q) = \left(1 + \frac{1}{2}x_1\right) - \delta_{q_1 q_2} \left(x_1 - \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) \left(x_1 - \delta_{q_1 q_2}\right).$$

Sfruttando quindi le definizioni di \mathbf{k} , equazioni (18) e (19), si ottiene la forma del contributo all'energia del sistema

$$\begin{aligned} E_{SKy}^{t_1} = & -\frac{t_1}{8} \sum_{i,j} \int \{ \phi_i^*(\mathbf{r}'_1) \phi_j^*(\mathbf{r}'_2) [\nabla_1^2 + \nabla_2^2 - \nabla_1 \cdot \nabla_2 - \nabla'_1 \cdot \nabla'_2] \\ & \cdot \left[\left(1 + \frac{1}{2}x_1\right) - \delta_{q_1 q_2} \left(x_1 - \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) \left(x_1 - \delta_{q_1 q_2}\right) \right] \\ & \cdot \phi_i(\mathbf{r}_1) \phi_j(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 |_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}'_1=\mathbf{r}_2=\mathbf{r}'_2} \}. \end{aligned}$$

Servendosi delle densità descritte in appendice A e svolgendo i calcoli, si può riscrivere la componente dell'energia dipendente da t_1

$$\begin{aligned} E_{SKy}^{t_1} = & \int \left\{ \frac{3t_1}{16} \left[-\left(1 + \frac{1}{2}x_1\right) \rho(\mathbf{r}) \nabla^2 \rho(\mathbf{r}) + \left(x_1 + \frac{1}{2}\right) \sum_q \rho(\mathbf{r})_q \nabla^2 \rho_q(\mathbf{r}) \right] \right. \\ & + \frac{t_1}{4} \left[\left(1 + \frac{1}{2}x_1\right) (\rho(\mathbf{r}) \tau(\mathbf{r}) - j(\mathbf{r})^2) - \left(x_1 + \frac{1}{2}\right) \sum_q (\rho_q(\mathbf{r}) \tau_q(\mathbf{r}) - j_q(\mathbf{r})^2) \right] \\ & \frac{t_1}{8} \left[x_1 \left(\mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{r}) - \sum_{\mu,\nu} J_{\mu\nu}^2 \right) - \sum_q \left(\mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{T}_q(\mathbf{r}) - \sum_{\mu,\nu} J_{q,\mu\nu}^2 \right) \right] \\ & \left. - \frac{3t_1}{32} \left[x_1 \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \nabla^2 \mathbf{S}(\mathbf{r}) - \sum_q \mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot \nabla^2 \mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \right] \right\} d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (24)$$

Il termine con t_2 è molto simile a quello con t_1 , l'unica differenza è la potenza dei momenti \mathbf{k} , che essendo dispari rende $\hat{P}_M = -1$. Inoltre è presente il prodotto $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'$, mentre in t_1 si ha il quadrato dei singoli \mathbf{k}

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' = -\frac{1}{2} [\nabla_1 \cdot \nabla'_1 - \nabla_1 \cdot \nabla'_2].$$

Ne consegue, molto similmente a t_1

$$\begin{aligned}
E_{S_{ky}}^{t_2} = & \int \left\{ \frac{t_2}{16} \left[\left(1 + \frac{1}{2}x_2 \right) \rho(\mathbf{r}) \nabla^2 \rho(\mathbf{r}) + \left(x_2 + \frac{1}{2} \right) \sum_q \rho(\mathbf{r})_q \nabla^2 \rho_q(\mathbf{r}) \right] \right. \\
& + \frac{t_2}{4} \left[\left(1 + \frac{1}{2}x_2 \right) (\rho(\mathbf{r})\tau(\mathbf{r}) - j(\mathbf{r})^2) + \left(x_2 + \frac{1}{2} \right) \sum_q (\rho_q(\mathbf{r})\tau_q(\mathbf{r}) - j_q(\mathbf{r})^2) \right] \\
& \frac{t_2}{8} \left[x_2 \left(\mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{r}) - \sum_{\mu,\nu} J_{\mu\nu}^2 \right) + \sum_q \left(\mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{T}_q(\mathbf{r}) - \sum_{\mu,\nu} J_{q,\mu\nu}^2 \right) \right] \\
& \left. \frac{t_2}{32} \left[x_2 \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \nabla^2 \mathbf{S}(\mathbf{r}) + \sum_q \mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot \nabla^2 \mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \right] \right\} d\mathbf{r} . \tag{25}
\end{aligned}$$

3.4 Termine di spin-orbita

Il termine d'interazione spin-orbita è fondamentale in ogni modello nucleare per ottenere una certa precisione fino a livello di struttura fine. In questo particolare caso il termine d'interazione spin-orbita è parametrizzato da W_0 . La componente di spin-orbita gioca un ruolo fondamentale, soprattutto per nuclei con numero atomico superiore a 20, per riprodurre i numeri magici. A livello atomico l'interazione spin-orbita di un elettrone è un'interazione di carattere dinamico generata dalla correlazione tra lo spin dell'elettrone stesso e il campo elettromagnetico prodotto dal nucleo. Similmente, Mayer e Jensen, su suggerimento di Fermi, ipotizzarono un'interazione della stessa natura per descrivere il nucleo, in una interazione tra spin e momento angolare orbitale del nucleone stesso. Tuttavia l'interazione spin-orbita all'interno del nucleo, seppur assuma una forma analoga a quella dell'elettrone nell'atomo, descrive una fisica molto diversa. Il termine di spin-orbita nucleare non è più una correzione trattabile perturbativamente, ma ha un peso non trascurabile. In Figura 2 si mostra l'effetto del termine di spin-orbita sui livelli energetici di singola particella.

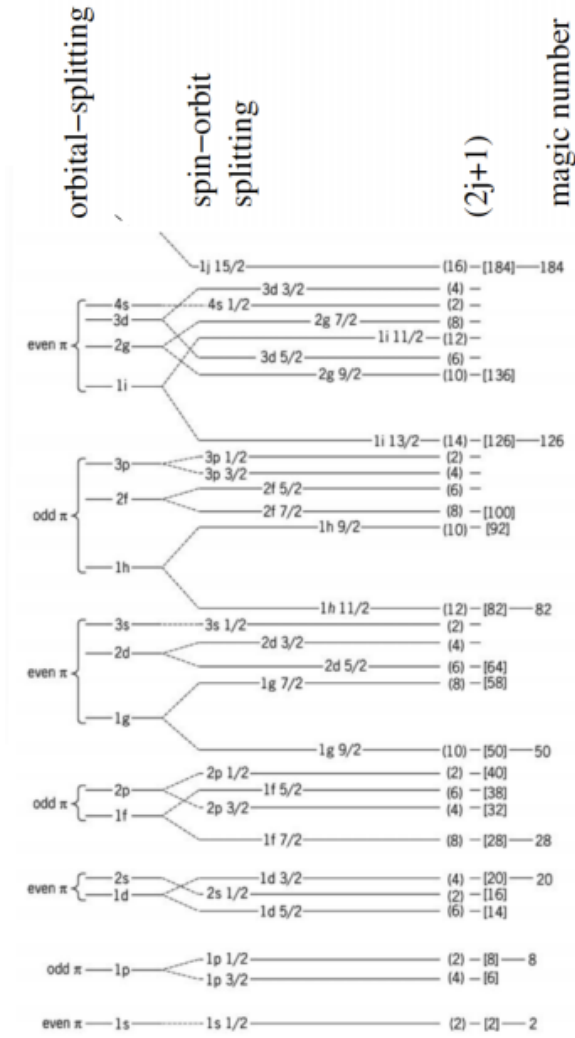


Figura 2: Splitting dei livelli di singola particella aggiungendo il termine di spin-orbita.

Il contributo del termine di spin-orbita si calcola analogamente agli altri, tenendo in considerazione che le potenze dei momenti sono dispari e dunque $\hat{P}_M = -1$

$$(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) \left(1 - \hat{P}_M \hat{P}_\sigma \hat{P}_q \right) = (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) (1 + \delta_{q_1 q_2}) ,$$

$$(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) (1 + \delta_{q_1 q_2}) \mathbf{k} \times \mathbf{k}' = -\frac{1}{2} (1 + \delta_{q_1 q_2}) \hat{\sigma}_1 \cdot [(\nabla_1 \times \nabla'_2) - (\nabla'_1 \times \nabla_2)] .$$

Utilizzando sempre le densità di appendice A, dove

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu, \nu} \epsilon_{\kappa \mu \nu} J_{\mu \nu}(\mathbf{r}) ,$$

si ottiene dunque,

$$E_{Sky}^{W_0} = -\frac{W_0}{2} \int \left\{ \left[(\rho(\mathbf{r})\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r})) + \sum_q (\rho_q(\mathbf{r})\nabla \cdot \mathbf{J}_q(\mathbf{r})) \right] + \left[\mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \mathbf{j}(\mathbf{r})) + \sum_q \mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \mathbf{j}_q(\mathbf{r})) \right] \right\} d\mathbf{r}. \quad (26)$$

3.5 Termine tensoriale

L'ultimo termine è quello tensoriale. Tale interazione gioca un ruolo fondamentale nella singola interazione nucleone-nucleone, per esempio, è rilevante in una collisione tra due nucleoni. Ciò nonostante in sistemi legati costituiti da molte componenti, come nel caso di un nucleo, tale termine diventa trascurabile. Non di meno è vero che si ha avuto ultimamente un rinnovato interesse per il termine tensoriale al fine di studio di nuclei esotici.

A livello fisico può essere spiegato come l'interazione nucleone-nucleone dovuta ai processi di scambio di pioni, includendo anche la correlazione tra coordinate spaziali e di spin di nucleoni con diverso isospin. A mano a mano che si aggiungono nucleoni al sistema, l'energie delle orbite con isospin diverso subiscono uno shift.

Per spiegare l'interazione tensoriale prendiamo due nucleoni in orbitali con spin parallelo e isospin opposto. Il momento angolare totale di un protone può essere $j_> = l + \frac{1}{2}$ oppure $j_< = l - \frac{1}{2}$, similmente per un neutrone posso avere $j'_>$ o $j'_<$. Se i due nucleoni interagenti sono uno $j_>$ ed uno $j_<$, la differenza di momento angolare totale sarà relativamente grande e quindi la funzione d'onda relativa ai due nucleoni sarà maggiormente distribuita lungo la direzione del momento angolare. In questo caso l'interazione sarà attrattiva. Al contrario, se i due nucleoni interagenti sono entrambi $j_>$ o $j_<$, si avrà una differenza di momento angolare totale dovuta solo ai momenti orbitali l e quindi relativamente piccola. L'effetto prodotto in questo caso è la repulsione tra i due nucleoni. Per nucleoni vicini alla superficie di Fermi l'effetto dell'interazione tensoriale è massimo.

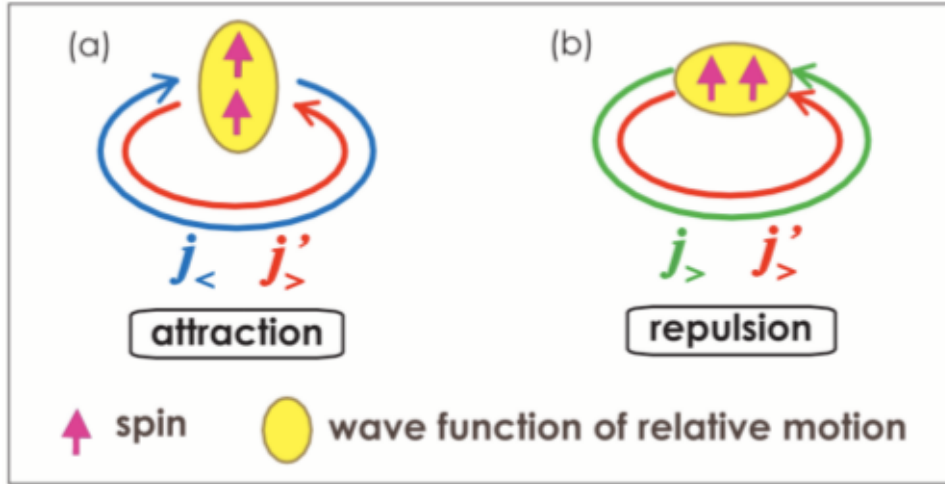


Figura 3: Rappresentazione dell'interazione tensoriale tra due orbite j e j'

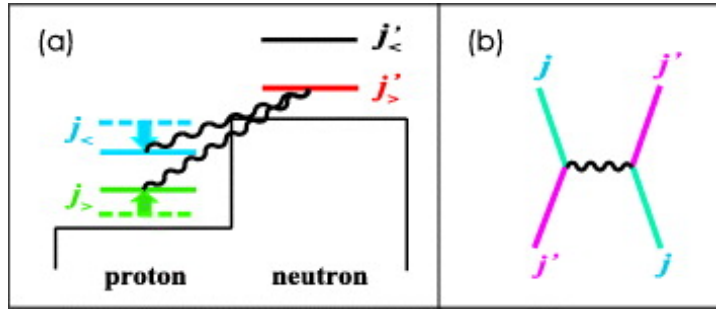


Figura 4: Interazione tensoriale tra due orbite j e j' mediata da un pione π e spostamento dei livelli energetici

Come dalla formula (17) l'interazione tensoriale è composta come una forza a range nullo con un termine dispari, proporzionale a t_e , ed uno pari, proporzionale a t_o .

Termine con t_e .

Come per gli altri contributi \hat{P}_M vale 1 per le potenze pari di \mathbf{k} e -1 per quelle dispari. Invece $\hat{P}_\sigma = 1$ perché l'interazione tensoriale è non nulla solo se gli spin dei due nucleoni sono paralleli.

Prima di passare all'integrale dell'energia si esplicitano i prodotti tra $\hat{\sigma}$ e \mathbf{k}

$$(\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) [\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2] = -\frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) [\nabla_1^2 + \nabla_1'^2 - \nabla_1 \cdot \nabla_2 - \nabla_1' \cdot \nabla_2'] ,$$

$$\begin{aligned} [(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k})(\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}) + (\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k}')(\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k}')] = & \frac{1}{4} [(\hat{\sigma}_1 \cdot \nabla_1)(\hat{\sigma}_2 \cdot \nabla_2) + (\hat{\sigma}_1 \cdot \nabla_1')(\hat{\sigma}_2 \cdot \nabla_2') \\ & - 2(\hat{\sigma}_1 \cdot \nabla_1)(\hat{\sigma}_2 \cdot \nabla_1) - 2(\hat{\sigma}_1 \cdot \nabla_1')(\hat{\sigma}_2 \cdot \nabla_1') \\ & + (\hat{\sigma}_1 \cdot \nabla_2)(\hat{\sigma}_2 \cdot \nabla_2) + (\hat{\sigma}_1 \cdot \nabla_1')(\hat{\sigma}_2 \cdot \nabla_2')] . \end{aligned}$$

Si ottiene dunque il contributo all'energia del termine con t_e

$$\begin{aligned}
E_{Sky}^{t_e} = & \frac{t_e}{8} \int \left\{ \frac{3}{2} (1 - \delta_{q_1 q_2}) \sum_{q_1, q_2, \mu, \nu} \left[(\nabla_{\mu_1} S_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) (\nabla_{\nu_2} S_{\nu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)) \right. \right. \\
& + (\nabla'_{\mu_1} S_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) (\nabla'_{\nu_2} S_{\nu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)) + (\nabla'_{\mu_1} S_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) (\nabla'_{\nu_2} S_{\mu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)) \\
& + (\nabla_{\mu_1} S_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) (\nabla_{\nu_2} S_{\mu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)) - 2 S_{\mu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) \nabla_{\mu_1} (\nabla_{\nu_2} S_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) \\
& \left. \left. - 2 S_{\mu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) \nabla'_{\mu_1} (\nabla'_{\nu_2} S_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) \right] \right. \\
& + (1 - \delta_{q_1 q_2}) \sum_{q_1, q_2, \mu, \nu} \left[S_{\nu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) (\nabla_{\mu_1}^2 + \nabla_{\mu_1}'^2) S_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \right. \\
& - (\nabla_{\mu_1} S_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) (\nabla_{\mu_2} S_{\nu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)) \\
& \left. \left. - (\nabla'_{\mu_1} S_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) (\nabla'_{\mu_2} S_{\nu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)) \right] \right\} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 \Big|_{\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}'_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}'_2} .
\end{aligned} \tag{27}$$

Termine con t_o .

I calcoli del secondo sono molto simili al termine con t_e

$$\begin{aligned}
E_{Sky}^{t_o} = & \frac{t_o}{8} \int \left\{ 3(1 + \delta_{q_1 q_2}) \sum_{q_1, q_2, \mu, \nu} \left[S_{\mu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) \nabla_{\mu_1} (\nabla'_{\nu_1} S_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) \right. \right. \\
& + S_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \nabla'_{\mu_2} (\nabla_{\nu_2} S_{\nu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)) - (\nabla'_{\mu_1} S_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) (\nabla_{\nu_2} S_{\nu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)) \\
& \left. \left. - (\nabla_{\nu_1} S_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) (\nabla'_{\mu_2} S_{\nu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)) \right] \right. \\
& - 2(1 + \delta_{q_1 q_2}) \sum_{q_1, q_2, \mu, \nu} \left[S_{\nu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) \nabla'_{\mu_1} \nabla_{\mu_1} S_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \right. \\
& \left. \left. - (\nabla_{\mu_1} S_{\nu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)) (\nabla'_{\mu_2} S_{\nu}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)) \right] \right\} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 \Big|_{\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}'_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}'_2} .
\end{aligned} \tag{28}$$

Unendo i due termini, con t_e e con t_o , si può scrivere la componente totale dell'energia dell'interazione tensoriale. Tenendo conto che:

$$\sum_{\mu\nu} S_{\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\nabla'_{\mu} \nabla'_{\nu} + \nabla_{\mu} \nabla_{\nu}) S_{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = - (2\mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) + (\nabla \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}))^2) ,$$

$$\sum_{\mu\nu} (\nabla'_{\mu} S_{\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\nabla_{\nu} S_{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = \frac{1}{4} (\nabla \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}))^2 + \left(\sum_{\mu} J_{\mu\mu}(\mathbf{r}) \right)^2 .$$

Il contributo dell'interazione tensoriale

$$\begin{aligned}
E_{Sky}^{tensore} = \int \left\{ \frac{3}{16} \left[(3t_e - t_o)(\nabla \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}))^2 - (3t_e + t_o) \sum_q (\nabla \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}))^2 \right] \right. \\
- \frac{1}{4} \left[(t_e + t_o) \left(\mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{T}(\mathbf{r}) - \sum_{\mu\nu} J_{\mu\nu}(\mathbf{r})^2 \right) \right. \\
- (t_e - t_o) \sum_q \left(\mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{T}_q(\mathbf{r}) - \sum_{\mu\nu} J_{q,\mu\nu}(\mathbf{r})^2 \right) \left. \right] \\
+ \frac{3}{4} \left[(t_e + t_o) \left(\mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} J_{\mu\nu}(\mathbf{r}) J_{\nu\mu}(\mathbf{r}) \right) \right. \\
- (t_e - t_o) \sum_q \left(\mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_q(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} J_{q,\mu\nu}(\mathbf{r}) J_{q,\nu\mu}(\mathbf{r}) \right) \left. \right] \\
+ \frac{1}{16} \left[(3t_e - t_o) \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \nabla^2 \mathbf{S}(\mathbf{r}) \right. \\
\left. - (3t_e + t_o) \sum_q \mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot \nabla^2 \mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \right] \left. \right\} d\mathbf{r} . \tag{29}
\end{aligned}$$

Nella maggior parte dei calcoli con il metodo di Hartre-Fock si presupponeva che il contributo dell'interazione tensoriale fosse trascurabile. Tuttavia è stato poi ripreso al fine di migliorare la precisione della descrizione dello splitting di spin-orbita in alcuni nuclei magici.

4 Simulazione con Sky3D

Sky3D è un programma scritto in Fortran 90 che si propone come codice per simulazioni di fisica nucleare. Gli scopi di questo programma sono sostanzialmente tre: calcolare il stato fondamentale di nuclei, eseguire simulazioni dinamiche di collisioni tra nuclei a basse energie sfruttando il TDHF (Time Dependent Hartree-Fock) e, sempre con il TDHF, simulare vibrazioni nucleari stimulate da un campo esterno. Sebbene quest'ultima applicazione sia utile ed interessante, in questo elaborato ci si limiterà ai soli primi due utilizzi del codice. Per dettagli maggiori si veda [8].

Il codice sfrutta, inoltre, due librerie esterne: LAPACK e FFTW3. LAPACK sta per Linear Algebra PACKage; è una libreria per computazioni algebriche, utile per risolvere simultaneamente sistemi di equazioni lineari o anche risolvere equazioni con il metodo dei minimi quadrati. FFTW3 (Fast Fourier Transform in the West) è una libreria che provvede a svolgere la trasformata di Fourier.

Una restrizione del codice è la mancanza di alcuni termini time-odd, dispari rispetto al tempo, nell'implementazione del funzionale di Skyrme; questo limita l'applicazione ai soli nuclei pari-pari. Un'altra restrizione è dovuta all'implementazione non relativistica dell'interazione. Tuttavia un grande privilegio che ne aumenta la possibilità di applicazione è l'assenza di restrizioni sulla simmetria del sistema. Non è richiesta a priori nessun tipo di simmetria, quali, per esempio, simmetria assiale o simmetria di riflessione.

Il funzionale dell'energia usato nel codice può essere scritto come:

$$E_{Sky} = T + (E_0 + E_1 + E_2 + E_{spin-orb}) + E_{Coul} + E_{pair} + E_{corr} , \quad (30)$$

Sfruttando sempre le densità descritte in appendice A.

T è l'energia cinetica

$$T = \sum_q \frac{\hbar}{2m_q} \int \tau_q(\mathbf{r}) d\mathbf{r} . \quad (31)$$

E_0 è il corrispettivo del termine centrale descritto nel paragrafo 3.1

$$E_0 = \int d\mathbf{r} \left(\frac{b_0}{2} \rho(\mathbf{r})^2 - \frac{b'_0}{2} \sum_q \rho_q(\mathbf{r})^2 \right) . \quad (32)$$

E_1 ed E_2 sono i termini cinetici dipendenti dal momento analizzati nel paragrafo 3.3

$$E_1 = \int d\mathbf{r} \left(b_1 (\rho(\mathbf{r})\tau(\mathbf{r}) - \mathbf{j}(\mathbf{r})^2) - b'_1 \sum_q (\rho_q(\mathbf{r})\tau_q(\mathbf{r}) - \mathbf{j}_q(\mathbf{r})^2) \right) , \quad (33)$$

$$E_2 = \int d\mathbf{r} \left(-\frac{b_2}{2} \rho(\mathbf{r}) \nabla^2 \rho(\mathbf{r}) + \frac{b'_2}{2} \sum_q \rho_q(\mathbf{r}) \nabla^2 \rho_q(\mathbf{r}) \right). \quad (34)$$

E_3 è il termine a molti corpi descritto al paragrafo 3.2

$$E_3 = \int d\mathbf{r} \left(\frac{b_3}{3} \rho(\mathbf{r})^{\alpha+2} - \frac{b'_3}{3} \rho(\mathbf{r})^\alpha \sum_q \rho_q(\mathbf{r})^2 \right). \quad (35)$$

$E_{spin-orb}$ rappresenta il termine di spin-orbita discusso al paragrafo 3.4

$$E_{spin-orb} = \int d\mathbf{r} \left(-b_4 (\rho(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) + \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \mathbf{j}(\mathbf{r}))) \right. \\ \left. - b'_4 \sum_q (\rho_q(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{J}_q(\mathbf{r}) + \mathbf{S}_q(\mathbf{r}) \cdot (\nabla \times \mathbf{j}_q(\mathbf{r}))) \right). \quad (36)$$

E_{Coul} è il termine d'interazione coulombiana costituito da due componenti descritte al paragrafo 3

$$E_{Coul} = \frac{e^2}{2} \int \int \frac{\rho_p(\mathbf{r}) \rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' - \frac{3}{4} e^2 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \int \rho_p(\mathbf{r})^{4/3} d\mathbf{r}. \quad (37)$$

Si nota immediatamente che i termini corrispondono a quelli del capitolo 3 dove, però, sono stati introdotti dei nuovi parametri e considerati solo i primi termini delle componenti dell'energia.

Infatti i parametri t e x sono correlati con b secondo

$$\begin{aligned}
b_0 &= t_0 \left(1 + \frac{1}{2}x_0 \right) \\
b'_0 &= t_0 \left(\frac{1}{2} + x_0 \right) \\
b_1 &= \frac{1}{4} \left[t_1 \left(1 + \frac{1}{2}x_1 \right) + t_2 \left(1 + \frac{1}{2}x_2 \right) \right] \\
b'_1 &= \frac{1}{4} \left[t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) - t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \right] \\
b_2 &= \frac{1}{8} \left[3t_1 \left(1 + \frac{1}{2}x_1 \right) - t_2 \left(1 + \frac{1}{2}x_2 \right) \right] \\
b'_2 &= \frac{1}{8} \left[3t_1 \left(\frac{1}{2} + x_1 \right) + t_2 \left(\frac{1}{2} + x_2 \right) \right] \\
b_3 &= \frac{1}{4}t_3 \left(1 + \frac{1}{2}x_3 \right) \\
b'_3 &= \frac{1}{4}t_3 \left(\frac{1}{2} + x_3 \right) \\
b_4 &= b'_4 = \frac{W_0}{2} .
\end{aligned} \tag{38}$$

Per quanto riguarda E_{pair} , è il termine dell'energia di pairing

$$E_{pair} = \frac{1}{4} \sum_{q \in \{p,n\}} V_{pair,q} \int d\mathbf{r} |\xi_q(\mathbf{r})|^2 \left[1 - \frac{\rho(\mathbf{r})}{\rho_0} \right] . \tag{39}$$

Nel quale il valore tipico del parametro di densità di saturazione ρ_0 è $0.16 fm^{-3}$, mentre $\xi_q(\mathbf{r})$ sono le densità di pairing e, $V_{pair,q}$, un parametro.

Nei nuclei doppiamente magici si ha che l'ultima shell è completamente riempita e il peso degli stati di occupazione è 1 o 0. L'interazione di pairing incomincia ad essere rilevante, invece, nello studio di nuclei a shell aperta. In tali nuclei l'interazione di pairing consente di popolare stati al di sopra dell'energia di Fermi. Tale interazione tra nucleone-nucleone è modellizzata da un termine di contatto dipendente dalla densità, DDDI (Density Dipendent Delta Interaction), con V_0 , α e ρ_0 parametri,

$$V_{pair} = \frac{V_q}{2} \left(1 - \hat{P}_\sigma \right) \left(1 - \left(\frac{\rho(\mathbf{r})}{\rho_0} \right)^\alpha \right) \delta_{12} . \tag{40}$$

Che per $\alpha = 1$ riconduce all'equazione (39). Tuttavia nelle simulazioni effettuate, avendo preso in esame nuclei magici, si è trascurato il termine di pairing aggiungendo nel file di

input l'opzione "pairing = 'NONE'".

E_{corr} rappresenta, infine, qualsiasi termine correttivo da apportare al sistema. Una correzione frequente è la correzione del centro di massa, non trascurabile per nuclei pesanti. Una strategia per applicare la correzione del centro di massa è quella di sostituire la massa m del nucleo con $m - \frac{m}{A}$.

4.1 Deformazione del nucleo

Gli osservabili più importanti sono sicuramente l'energia e le densità, tuttavia è molto utile studiare i momenti di quadrupolo direttamente collegati ai parametri di deformazione del nucleo. Il tensore di quadrupolo è definito in funzione del momento del centro di massa $\vec{R}^{(type)}$,

$$\vec{R}^{(type)} = \frac{\int d\mathbf{r} \mathbf{r} \rho^{(type)}(\mathbf{r})}{\int d\mathbf{r} \rho^{(type)}(\mathbf{r})}. \quad (41)$$

Dove $(type)$ indica p per i protoni e n per in neutroni.

Il momento di quadrupolo, scritto in coordinate cartesiane r_i , è dunque

$$Q_{kl}^{(type)} = \int d\mathbf{r} \left(3(r_k - R_k)(r_l - R_l) - \delta_{kl} \sum_i (r_j - R_j)^2 \right) \rho^{(type)} \mathbf{r}. \quad (42)$$

Il precedente tensore di quadrupolo non è invariante per rotazione, perciò è più conveniente diagonalizzare tale matrice passando al sistema di riferimento degli assi principali. Queste operazioni sono svolte, nel codice, nel modulo `Moment`, in particolare la diagonalizzazione è computata nella subroutine `q2diag`. Si ottengono così solo tre componenti non nulle Q_{xx} , Q_{yy} e Q_{zz} . Da tenere in considerazione è la condizione che la traccia sia nulla e quindi $Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz} = 0$. Spesso sono utili i momenti di quadrupolo sferici, così definiti

$$Q_{2m}^{(type)} = \int d\mathbf{r} r^2 Y_{2m} \rho^{(type)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (43)$$

dove le Y_{2m} sono le armoniche sferiche. Questi quadrupoli sferici sono spesso espressi in variabili adimensionali, riscalandolo per il numero di massa totale A e il modulo del momento del centro di massa R ,

$$a_m = \frac{4\pi}{5} \frac{Q_{2m}}{AR^2}. \quad (44)$$

In cui $R = r_0 A^{1/3}$. Tali momenti adimensionali favoriscono la descrizione della distribuzione spaziale del nucleo. Tuttavia i momenti a_m non sono invarianti per rotazione. Perciò risulta più semplice passare al sistema di assi principali, in cui abbiamo le condizioni $a_{\pm 1} = 0$ e $a_2 = a_{-2}$.

Partendo dunque dai momenti di quadrupolo si arriva a definire a_0 e a_2 da cui si ottengono i parametri di Bohr-Mottelson

$$\beta = \sqrt{a_0^2 + 2a_2^2}, \quad \gamma = \arctg \left(\frac{\sqrt{2}a_2}{a_0} \right). \quad (45)$$

β rappresenta la deformazione totale, mentre γ l'orientazione di tale deformazione. Tali parametri possono essere sfruttati anche per l'analisi di vibrazioni nucleari prodotte da un campo esterno oscillante.

4.2 Simulazione dello stato fondamentale con Skyrme-Hartree-Fock

Nelle simulazioni effettuate si sono presi in esame nuclei magici, quali, ad esempio: $^{16}_8\text{O}$, $^{40}_{20}\text{Ca}$, $^{56}_{28}\text{Ni}$, $^{100}_{50}\text{Sn}$, ma anche $^{208}_{82}\text{Pb}$.

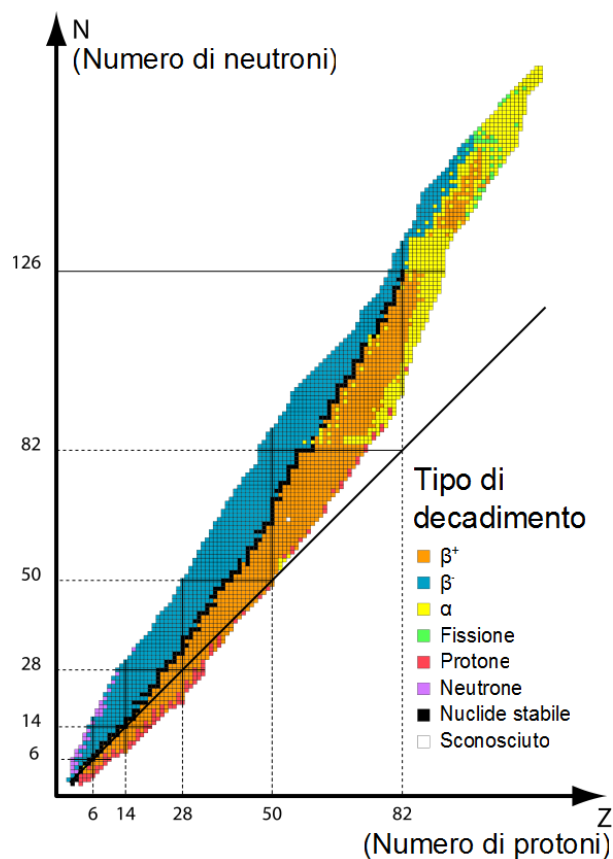


Figura 5: Grafico che mostra la stabilità dei nuclei

La figura precedente mostra quale decadimento è più probabile in vari nuclei, evidenziando quelli più stabili in nero. Come si può notare il $^{126}_{82}\text{Pb}$, pur essendo doppiamente magico, non è osservabile in natura e neanche riportato nel grafico. Perciò si è scelto il $^{208}_{82}\text{Pb}$ che è stabile e doppiamente magico.

In una simulazione, in cui si voglia studiare lo stato fondamentale di un nucleo, si utilizza la namelist `static` per dare in input il numero di neutroni e protoni, insieme ad altri parametri utili per l'algoritmo iterativo. L'equazione che si vuole risolvere è:

$$\hat{h}\phi_\alpha = \varepsilon_\alpha\phi_\alpha . \quad (46)$$

Nella quale \hat{h} è l'hamiltoniana del campo medio, ottenuta dalla variazione $\frac{\partial E}{\partial \phi_\alpha^*} = \hat{h}\phi_\alpha$. Si ha quindi

$$\hat{h}_q = U_q(\mathbf{r}) - \nabla \cdot [B_q(\mathbf{r})\nabla] + i\mathbf{W}_q \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla) + \mathbf{S}_q \cdot \boldsymbol{\sigma} - \frac{i}{2} [(\nabla \cdot \mathbf{A}_q) + 2\mathbf{A}_q \nabla] . \quad (47)$$

In cui U_q agisce come un potenziale locale del campo medio

$$\begin{aligned} U_q &= b_0\rho - b'_0\rho_q + b_1\tau - b'_1\tau_q - b_2\nabla^2\rho + b'_2\nabla^2\rho_q \\ &+ b_3\frac{\alpha+2}{3}\rho^{\alpha+1} - b'_3\frac{2}{3}\rho^\alpha\rho_q - b'_3\frac{\alpha}{3}\rho^{\alpha-1}\sum_{q'}\rho_{q'}^2 \\ &- b_4\nabla \cdot \mathbf{J} - b'_4\nabla \cdot \mathbf{J}_q . \end{aligned} \quad (48)$$

Il secondo termine, B_q , invece rappresenta la massa efficace del nucleone q

$$B_q = \frac{\hbar^2}{2m_q} + b_1\rho - b'_1\rho_q . \quad (49)$$

\mathbf{W}_q è il potenziale di spin-orbita

$$\mathbf{W}_q = b_4\nabla\rho + b'_4\nabla\rho_q . \quad (50)$$

Gli ultimi due termini tengono conto degli effetti dinamici

$$\mathbf{A}_q = -2b_1\mathbf{j} + 2b'_1\mathbf{j}_q - b_4\nabla \times \mathbf{s} - b'_4\nabla \times \mathbf{s}_q , \quad (51)$$

$$\mathbf{S}_q = -b_4\nabla \times \mathbf{j} - b'_4\nabla \times \mathbf{j}_q . \quad (52)$$

La soluzione nel campo medio è calcolata in maniera iterativa, partendo da una funzione d'onda di ordine zero e corretta al passo successivo secondo la formula

$$\phi_\alpha^{(n+1)} = O \left\{ \phi_\alpha^{(n)} - \frac{\delta}{\hat{T} + E_0} \left(\hat{h}^{(n)} - \langle \phi_\alpha^{(n)} | \hat{h}^{(n)} | \phi_\alpha^{(n)} \rangle \right) \phi_\alpha^{(n)} \right\} . \quad (53)$$

In cui $O\{\}$ indica il processo di ortonormalizzazione di Gram-Schmidt e \hat{T} rappresenta l'energia cinetica. L'algoritmo iterativo ha due parametri, δ che determina il passo dell'iterazione, mentre E_0 regola lo smorzamento. I valori usuali per il parametro δ variano da 0.1 a 0.8, per quel che riguarda E_0 , invece, è solito prenderlo dell'ordine di grandezza di U_q ; un buon valore può essere 100 MeV. In particolare nella simulazione si è usato $\delta = 0.4$ e $E_0 = 100$.

4.2.1 Ossigeno $^{16}_8\text{O}$

Per utilizzare il codice è necessario un file di input in cui si specificano i valori dei vari parametri secondo le necessità (descritto in appendice B).

Di seguito si forniscono i livelli energetici delle shell sia dei protoni che dei neutroni.

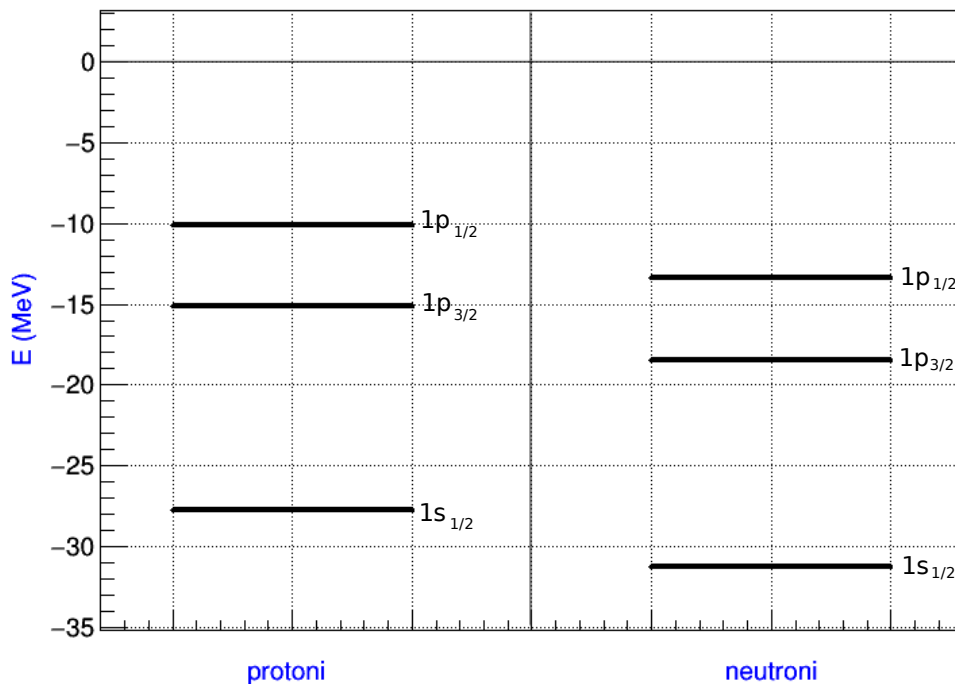


Figura 6: livelli di energia dei nucleoni di $^{16}_8\text{O}$

Come intuibile, i protoni sono vincolati in una buca di potenziale meno profonda rispetto ai neutroni, ciò dovuto alla repulsione coulombiana.

Oltre al codice, nel quale è stato implementato il metodo di Skyrme-Hartree-Fock, in sky3d sono fornite anche alcune utilities; programmi, sempre scritti in Fortran 90, che servono a ottenere dagli output files dati relativi alla simulazione effettuata. Tra questi "cuts" estrapola dai files `nnnnnn.tdd` la densità di massa del nucleo, producendo tre file come output: `nnnnnrxy.txt`, `nnnnnrxz.txt` e `nnnnnrzy.txt`. In questi files `nnnnnn` sta ad indicare il numero dell'iterazione dell'algoritmo. I tre file `.txt`, invece, contengono i dati della densità di massa sui vari piani (x, y) , (x, z) e (y, z) . Durante la simulazione viene prodotto un file `*.tdd` ogni 100 iterazioni, tuttavia essendo l'ultima iterazione quella che ha raggiunto la convergenza del metodo, ci si servirà solamente dell'ultimo `*.tdd` prodotto.

Di seguito si forniscono i valori della densità del nucleo $^{16}_8\text{O}$.

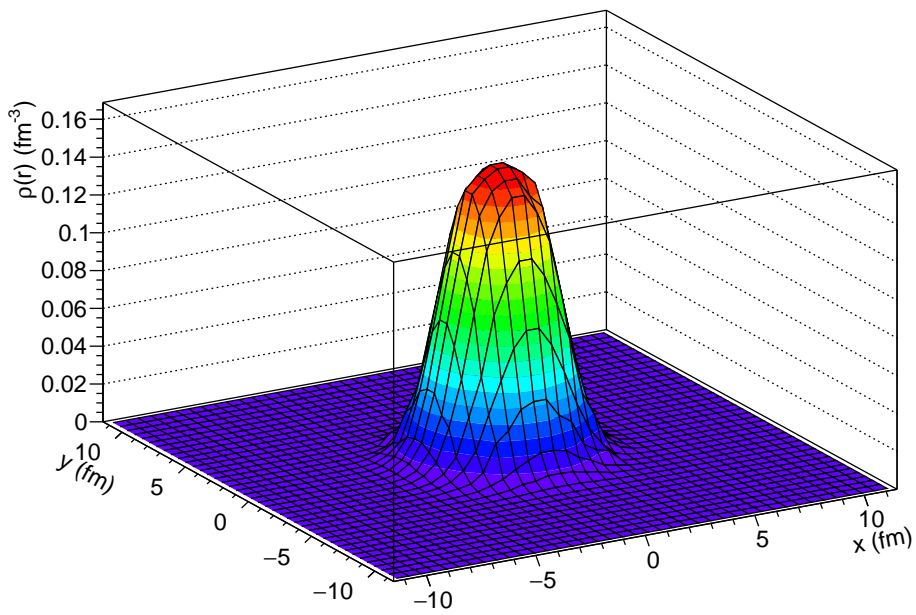


Figura 7: sezione della densità radiale nel piano xy dell' $^{16}_8\text{O}$

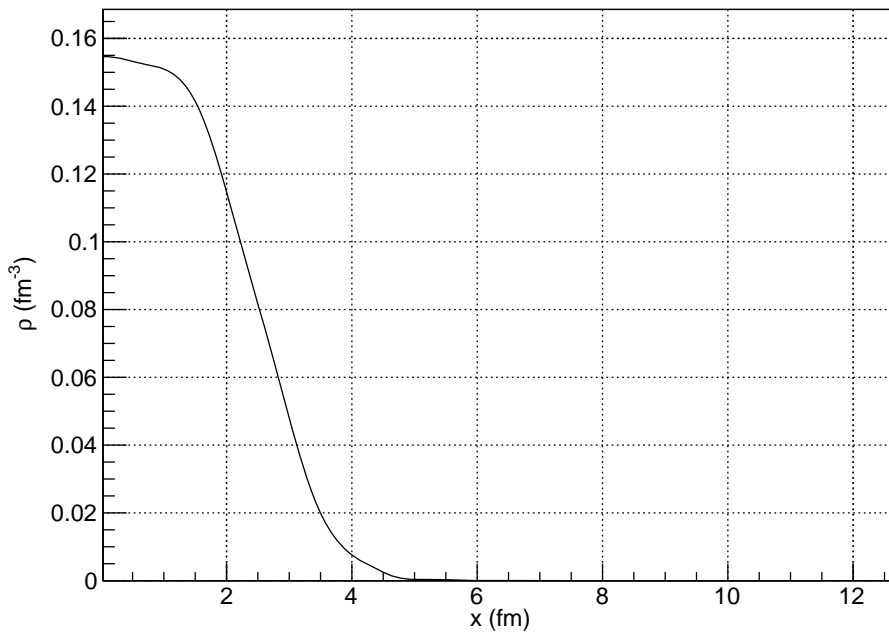


Figura 8: sezione della densità per $y=0$ e $z=0$ dell' $^{16}_8\text{O}$

Un file utile, prodotto dall'output della simulazione è `conver.res`, nel quale si può notare la convergenza dell'algoritmo, con la variazione di energia tra un'iterazione e l'altra che diminuisce sempre di più.

<i>Iter</i>	<i>Energia (MeV)</i>	<i>d.energia (MeV)</i>	<i>rms (fm)</i>	β	γ
0	-89.12	1.00	3.288	0.000	1.9
100	-116.61	$-6.767E - 06$	2.689	0.000	25.8
200	-116.63	$-2.257E - 09$	2.688	0.000	26.0
300	-116.63	$7.036E - 12$	2.688	0.000	26.0
400	-116.63	$4.248E - 14$	2.688	0.000	26.1
<i>valori sperimentali</i>		<i>Energia (MeV)</i>	<i>rms (fm)</i>		
		-127.62	2.718		

Nella prima colonna da sinistra si ha il numero dell'iterazione dell'algoritmo. Nella seconda colonna l'energia totale del sistema espressa in (MeV), mentre la terza colonna si ha la variazione di energia tra quell'iterazione e la successiva. Infine le ultime tre colonne mostrano rispettivamente il raggio quadratico medio, in Fermi e i parametri di deformazione β e γ , definiti in (45). L'ultima riga riporta il valore sperimentale dell'energia di legame del nucleo e del raggio quadratico medio, ottenuti rispettivamente da [9] e [10]. In particolare β è il *parametro di deformazione*, mentre γ il *parametro di simmetria assiale*. Essendo $\beta = 0$ significa che il nucleo ha una forma sferica e non ad elissoide, questo è reso ancora più chiaro dal tensore d'inerzia.

$$I_O = \begin{bmatrix} 77.095 & 0.000 & 0.000 \\ 0.000 & 77.095 & 0.000 \\ 0.000 & 0.000 & 77.095 \end{bmatrix}$$

Tra i vari file prodotti dal calcolo dello stato fondamentale dei nucleoni si ottiene anche `016`. In questo sono immagazzinati tutti i dati relativi alle funzioni d'onda calcolate. L'utilità di `016` è non tanto nell'analisi del nucleo, quanto piuttosto nel riutilizzo di tale file come punto di partenza per simulazioni di collisione tra nuclei. Verrà poi ripreso nel seguente paragrafo sulla simulazione dinamica di Skyrme-Hartree-Fock.

4.2.2 Calcio ${}^{40}_{20}\text{Ca}$

Di seguito i dati del ${}^{40}_{20}\text{Ca}$, in cui il file di input è uguale a quello riportato in appendice B, ma con l'unica differenza dei parametri $n_{\text{prot}} = 20$ e $n_{\text{neut}} = 20$.

Si sono quindi ottenuti i livelli enegitici dei nucleoni.

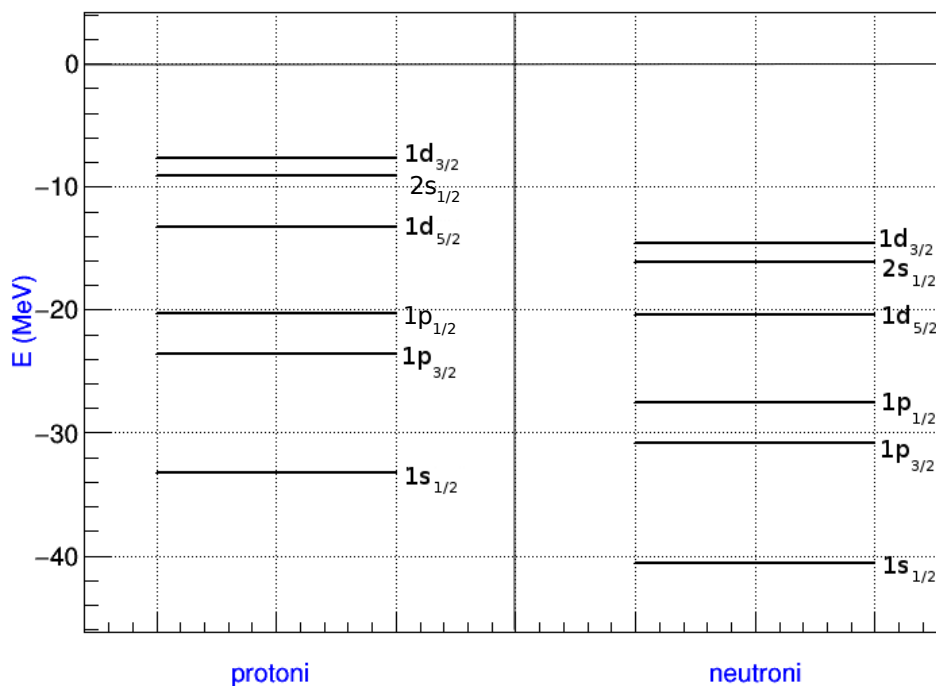


Figura 9: livelli di energia dei nucleoni di ${}^{40}_{20}\text{Ca}$

Sempre con il programma "cuts" si sono ricavati i dati sulla densità del nucleo di Calcio esaminato.

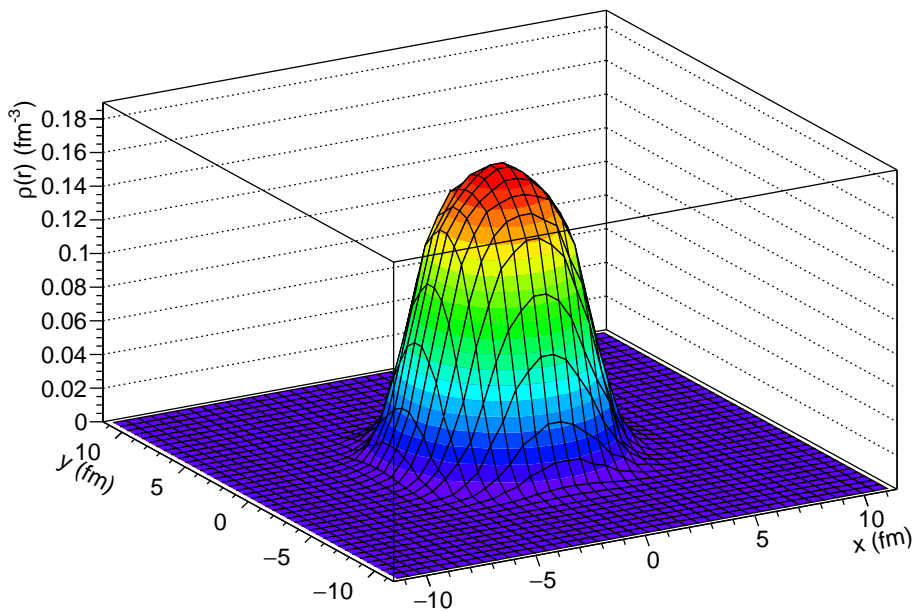


Figura 10: sezione della densità radiale nel piano xy dell' ${}^{40}_{20}\text{Ca}$

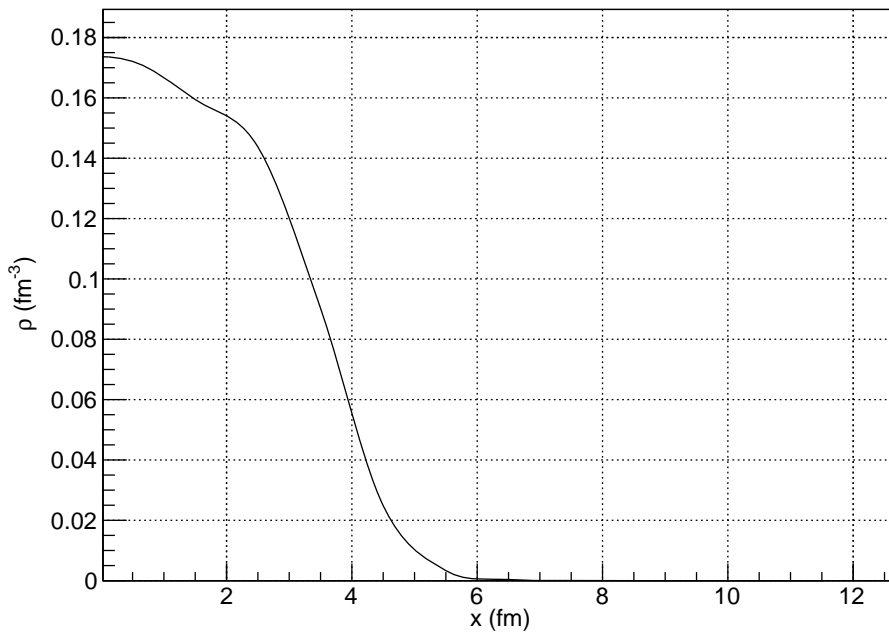


Figura 11: sezione della densità per $y=0$ e $z=0$ dell' ${}^{40}_{20}\text{Ca}$

Infine si riportano i dati dal file `conver.res`.

<i>Iter</i>	<i>Energia (MeV)</i>	<i>d.energia (MeV)</i>	<i>rms (fm)</i>	β	γ
0	-298.69	1.00	3.797	0.000	1.8
100	-332.97	-2.372E - 05	3.388	0.000	25.2
200	-333.03	-4.354E - 08	3.386	0.000	25.2
300	-333.03	-8.478E - 11	3.386	0.000	25.2
400	-333.03	-1.379E - 13	3.386	0.000	25.2
500	-333.03	3.713E - 16	3.386	0.000	25.2
600	-333.03	4.407E - 16	3.386	0.000	25.2
700	-333.03	-8.480E - 18	3.386	0.000	25.0
800	-333.03	-8.605E - 17	3.386	0.000	25.1
900	-333.03	-2.238E - 16	3.386	0.000	27.6
1000	-333.03	-2.443E - 16	3.386	0.000	21.6
1100	-333.03	9.341E - 17	3.386	0.000	23.2
1200	-333.03	-6.672E - 16	3.386	0.000	42.0
1300	-333.03	3.694E - 16	3.386	0.000	15.7
1400	-333.03	2.179E - 16	3.386	0.000	10.0
1500	-333.03	2.365E - 16	3.386	0.000	21.3
1600	-333.03	2.866E - 16	3.386	0.000	13.5
1700	-333.03	1.924E - 16	3.386	0.000	15.4
1800	-333.03	1.018E - 16	3.386	0.000	20.1
1900	-333.03	-2.078E - 16	3.386	0.000	20.5
2000	-333.03	-2.001E - 16	3.386	0.000	10.0
<i>valori sperimentali</i>		<i>Energia (MeV)</i>	<i>rms (fm)</i>		
		-342.05	3.450		

Anche in questo caso il valore sperimentale dell'energia è stato ottenuto da [9], mentre quello del raggio quadratico medio da [10]. Di seguito il tensore d'inerzia del ${}^{40}_{20}\text{Ca}$.

$$I_{Ca} = \begin{bmatrix} 305.797 & 0.000 & 0.000 \\ 0.000 & 305.797 & 0.000 \\ 0.000 & 0.000 & 305.797 \end{bmatrix}$$

4.2.3 Nichel $^{56}_{28}\text{Ni}$

Come per i nuclei precedenti si forniscono i livelli energetici dei nucleoni che il programma scrive su standard output, ma che, per comodità, si è reindirizzato su un file denominato `for006.static`. In tale file ogni 100 iterazioni dell'algoritmo vengono stampati varie informazioni del nucleo, tra cui anche l'energia di ogni singolo nucleone.

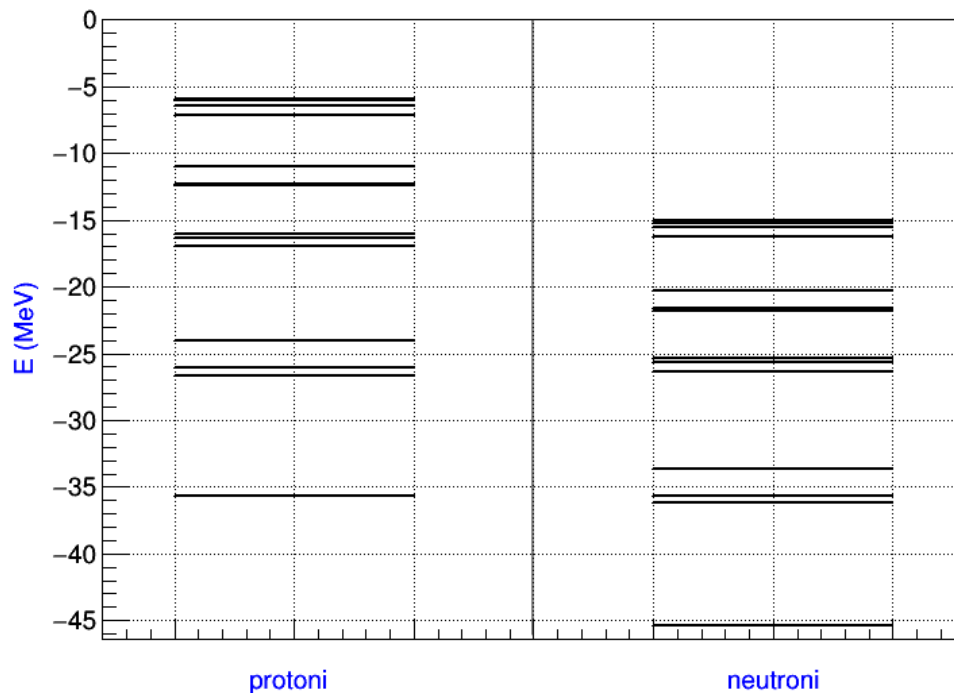


Figura 12: livelli di energia dei nucleoni di $^{56}_{28}\text{Ni}$

La densità di massa nel nucleo, estrapolata dai file `*.tdd`, dove `*` indica il numero dell'iterazione dell'algoritmo.

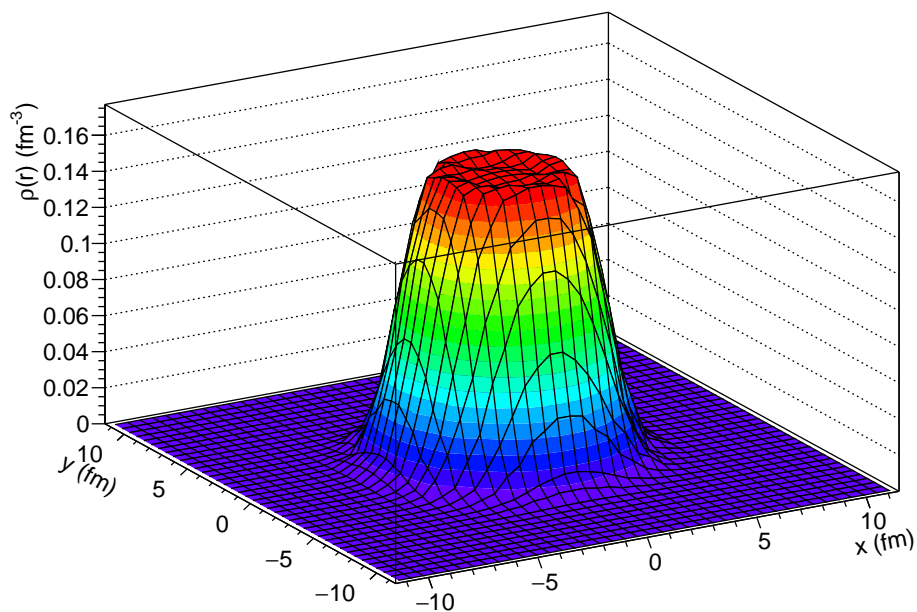


Figura 13: sezione della densità radiale nel piano xy dell' $^{56}_{28}\text{Ni}$

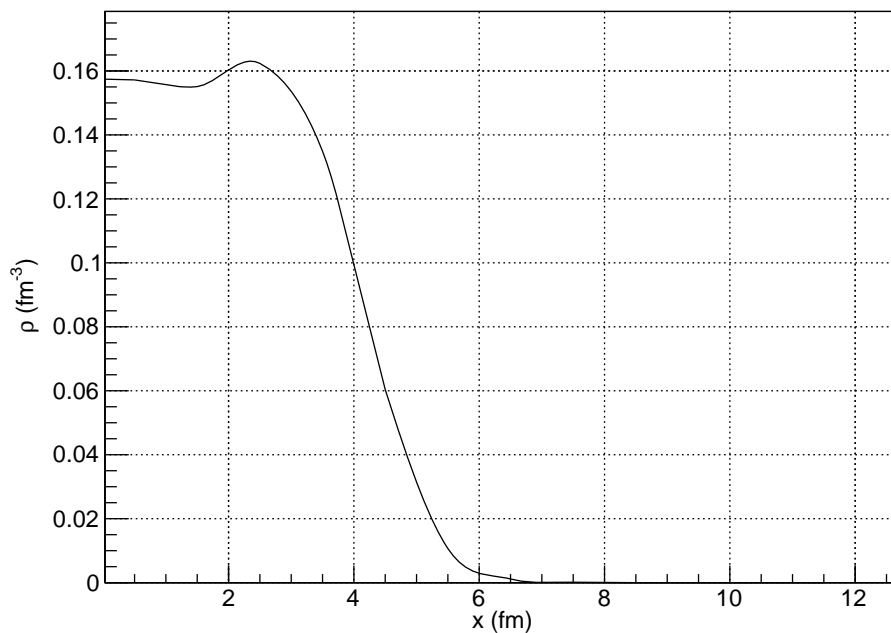


Figura 14: sezione della densità per $y=0$ e $z=0$ dell' $^{56}_{28}\text{Ni}$

Di seguito i dati durante le varie iterazioni.

<i>Iter</i>	<i>Energia (MeV)</i>	<i>d.energia (MeV)</i>	<i>rms (fm)</i>	β	γ
0	-408.51	1.00	4.059	0.155	60.0
100	-467.28	1.011E - 04	3.795	0.201	60.0
200	-470.08	1.759E - 05	3.746	0.168	60.0
300	-470.78	8.069E - 06	3.725	0.148	60.0
400	-471.06	4.934E - 06	3.714	0.136	60.0
500	-471.20	3.453E - 06	3.706	0.127	60.0
600	-471.29	2.649E - 06	3.701	0.119	60.0
700	-471.36	2.176E - 06	3.697	0.113	60.0
800	-471.40	1.885E - 06	3.693	0.107	60.0
900	-471.44	1.704E - 06	3.690	0.102	60.0
1000	-471.48	1.593E - 06	3.688	0.097	60.0
1100	-471.51	1.531E - 06	3.685	0.093	60.0
1200	-471.55	1.504E - 06	3.683	0.088	60.0
1300	-471.58	1.504E - 06	3.681	0.083	60.0
1400	-471.61	1.523E - 06	3.679	0.078	60.0
1500	-471.65	1.553E - 06	3.677	0.073	60.0
1600	-471.69	1.584E - 06	3.675	0.068	60.0
1700	-471.73	1.606E - 06	3.673	0.063	60.0
1800	-471.77	1.604E - 06	3.671	0.057	60.0
1900	-471.82	1.567E - 06	3.669	0.052	60.0
2000	-471.86	1.482E - 06	3.668	0.046	60.0
<i>valori sperimentali</i>		<i>Energia (MeV)</i>	<i>rms (fm)</i>		
		-483.99			

Per il $^{56}_{28}\text{Ni}$, tuttavia, non si sono riusciti a recuperare dati sperimentali del raggio, mentre l'energia è ricavata sempre da [9].

Come si può notare nella soprastante tabella, il valore di β non è esattamente zero, ciò dimostra che il nucleo di $^{56}_{28}\text{Ni}$ non è esattamente sferico. A riprova di ciò si fornisce anche il tensore d'inerzia, estrapolato dai file di output con l'utilities Inertia, presente sempre in sky3d.

$$I_{Ni} = \begin{bmatrix} 490.910 & 0.000 & 0.000 \\ 0.000 & 490.910 & 0.000 \\ 0.000 & 0.000 & 525.074 \end{bmatrix}$$

4.2.4 Stagno $^{100}_{50}\text{Sn}$

Si continua ora con i dati relativi allo $^{100}_{50}\text{Sn}$. I livelli energetici dei nucleoni sono:

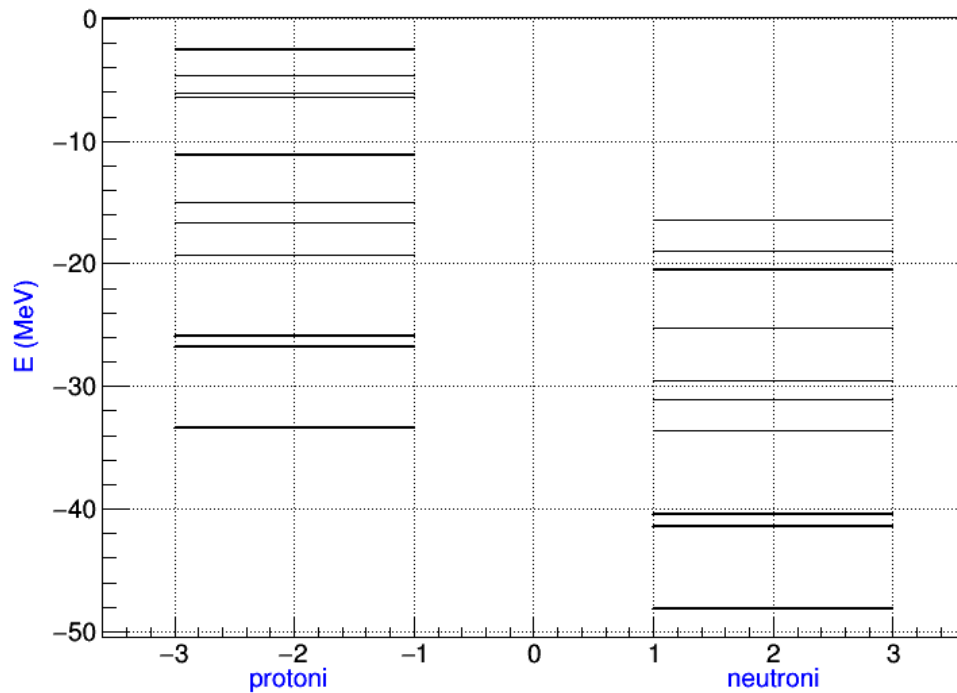


Figura 15: livelli di energia dei nucleoni di $^{100}_{50}\text{Sn}$

Specialmente in questo nucleo si nota la differenza tra i livelli dei protoni e quelli dei neutroni.

La densità di massa nel nucleo.

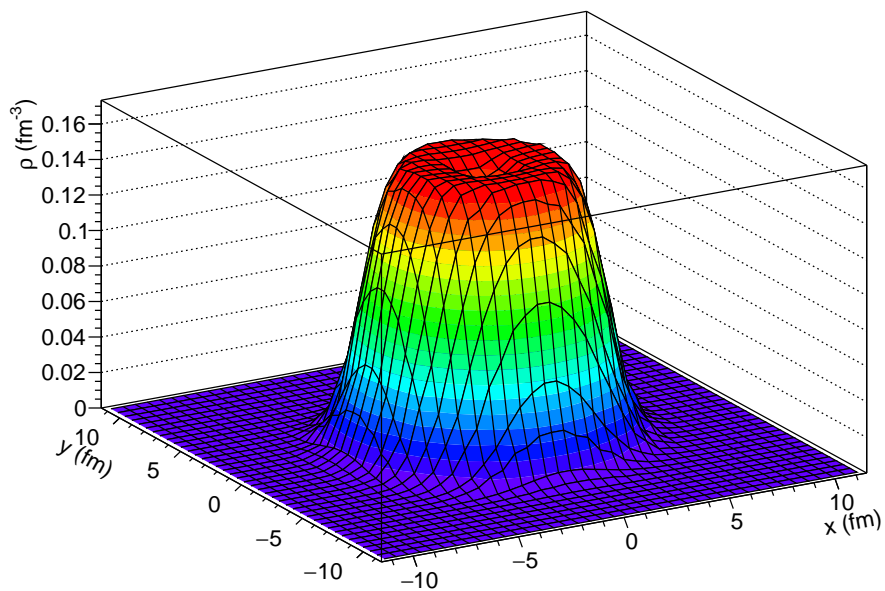


Figura 16: sezione della densità radiale nel piano xy dell' $^{100}_{50}\text{Sn}$

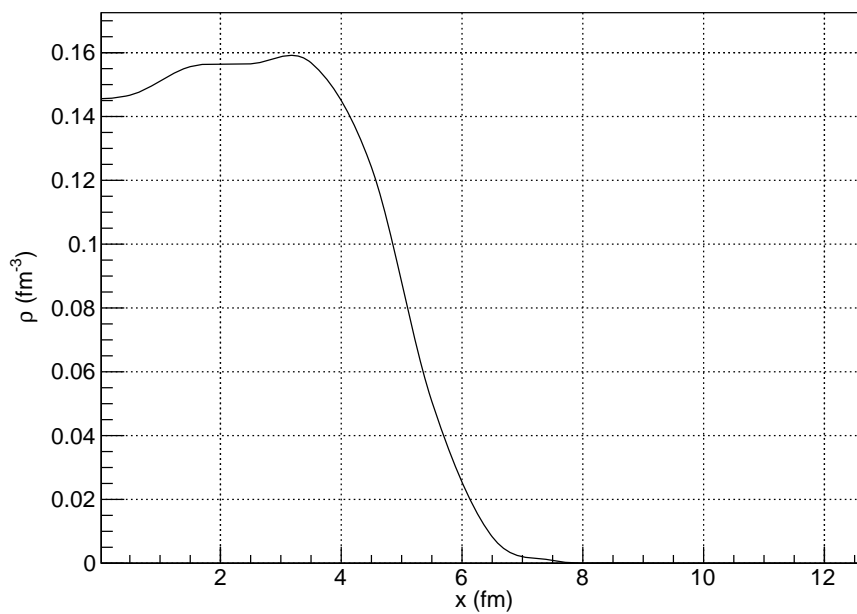


Figura 17: sezione della densità per $y=0$ e $z=0$ dell' $^{100}_{50}\text{Sn}$

Di seguito i dati durante le varie iterazioni.

<i>Iter</i>	<i>Energia (MeV)</i>	<i>d.energia (MeV)</i>	<i>rms (fm)</i>	β	γ
0	-716.19	0.800	4.439	0.098	60.0
100	-801.94	2.745E - 04	4.478	0.145	60.0
200	-808.85	6.846E - 05	4.430	0.111	60.0
300	-812.59	5.467E - 05	4.403	0.080	60.0
400	-815.13	4.161E - 05	4.388	0.054	60.0
500	-816.66	2.244E - 05	4.380	0.033	60.0
600	-817.35	8.807E - 06	4.376	0.020	60.0
700	-817.61	2.847E - 06	4.375	0.011	60.0
800	-817.69	8.313E - 07	4.375	0.006	60.0
900	-817.71	2.282E - 07	4.375	0.003	60.0
1000	-817.72	5.937E - 08	4.375	0.002	60.0
1100	-817.72	1.441E - 08	4.375	0.001	60.0
1200	-817.72	3.094E - 09	4.375	0.001	60.0
1300	-817.72	4.873E - 10	4.375	0.000	60.0
1400	-817.72	-1.265E - 11	4.375	0.000	60.0
1500	-817.72	-6.138E - 11	4.375	0.000	60.0
1600	-817.72	-3.941E - 11	4.375	0.000	60.0
1700	-817.72	-1.951E - 11	4.375	0.000	60.0
1800	-817.72	-8.683E - 12	4.375	0.000	60.0
1900	-817.72	-3.648E - 12	4.375	0.000	60.0
2000	-817.72	-1.480E - 12	4.375	0.000	60.0
<i>valori sperimentali</i>		<i>Energia (MeV)</i>	<i>rms (fm)</i>		
		-825.30	4.5808		

Per lo stagno, invece, il valore di rms lo si è preso da [11] e l'energia da [9], così come successivamente per il piombo.

Lo $^{100}_{50}\text{Sn}$ presenta chiaramente una simmetria sferica, infatti il suo tensore d'inerzia.

$$I_{Sn} = \begin{bmatrix} 1275.774 & 0.000 & 0.000 \\ 0.000 & 1275.774 & 0.000 \\ 0.000 & 0.000 & 1275.782 \end{bmatrix}$$

4.2.5 Piombo $^{208}_{82}Pb$

Infine lo spettro energetico del $^{208}_{82}Pb$.

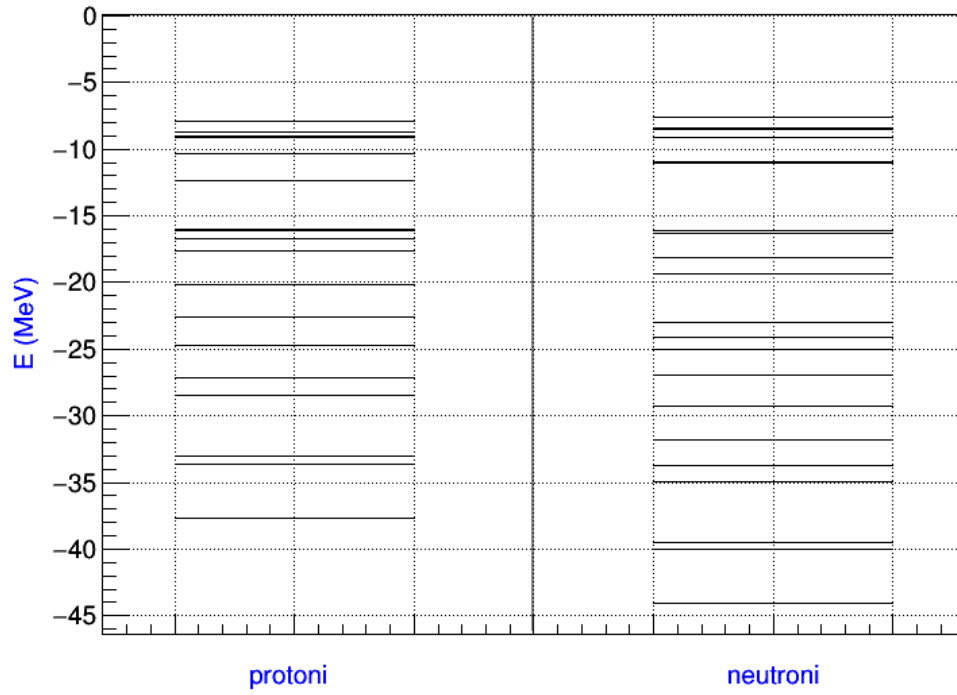


Figura 18: livelli di energia dei nucleoni di $^{208}_{82}Pb$

A seguire la densità del nucleo.

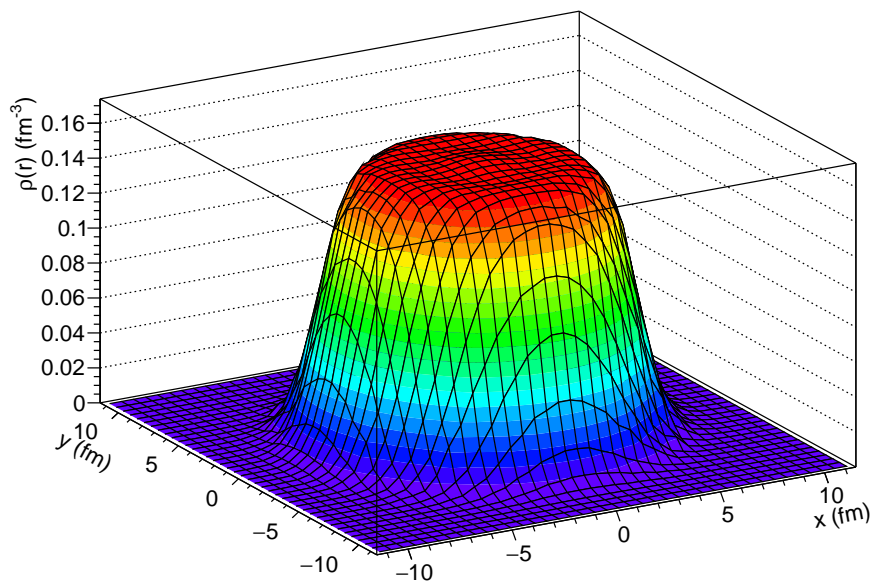


Figura 19: sezione della densità radiale nel piano xy dell' $^{208}_{82}\text{Pb}$

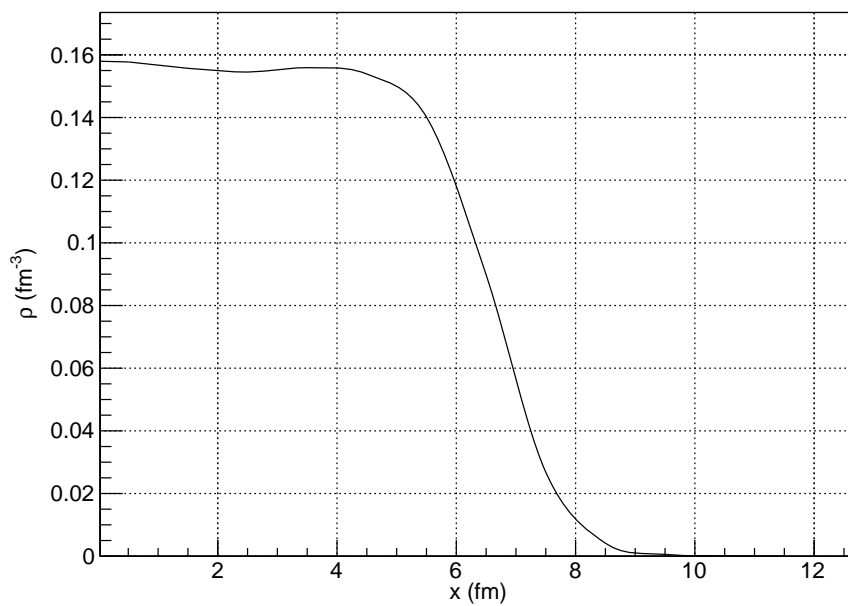


Figura 20: sezione della densità per $y=0$ e $z=0$ dell' $^{208}_{82}\text{Pb}$

I dati dell'energia durante le varie iterazioni.

<i>Iter</i>	<i>Energia (MeV)</i>	<i>d.energia (MeV)</i>	<i>rms (fm)</i>	β	γ
0	-1075.32	0.712	5.009	0.052	60.0
100	-1597.43	4.454E - 04	5.592	0.084	60.0
200	-1618.63	9.658E - 05	5.564	0.051	60.0
300	-1627.80	2.129E - 05	5.544	0.025	60.0
400	-1630.34	3.723E - 06	5.538	0.011	60.0
500	-1630.87	6.816E - 07	5.537	0.005	60.0
600	-1630.96	1.547E - 07	5.536	0.002	60.0
700	-1630.98	4.320E - 08	5.536	0.001	60.0
800	-1630.98	1.394E - 08	5.536	0.000	60.0
900	-1630.98	4.927E - 09	5.536	0.000	60.0
1000	-1630.98	1.829E - 09	5.536	0.000	60.0
1100	-1630.98	6.965E - 10	5.536	0.000	60.0
1200	-1630.98	2.683E - 10	5.536	0.000	60.0
1300	-1630.98	1.039E - 10	5.536	0.000	60.0
1400	-1630.98	4.032E - 11	5.536	0.000	60.0
1500	-1630.98	1.566E - 11	5.536	0.000	60.0
1600	-1630.98	6.084E - 12	5.536	0.000	60.0
1700	-1630.98	2.363E - 12	5.536	0.000	60.0
1800	-1630.98	9.180E - 13	5.536	0.000	60.0
1900	-1630.98	3.566E - 13	5.536	0.000	60.0
2000	-1630.98	1.384E - 13	5.536	0.000	60.0
<i>valori sperimentali</i>		<i>Energia (MeV)</i>	<i>rms (fm)</i>		
		-1636.43	5.5046		

Nella precedente tabella si può notare come, già dalla 700^a iterazione, l'energia rimanga pressochè costante e si nota che anche il raggio quadratico medio (rms) e il parametro β si stabilizzano. Questo è uno dei segnali che l'algoritmo ha raggiunto la convergenza. Infine il tensore d'inerzia del nucleo $^{208}_{82}Pb$.

$$I_{Pb} = \begin{bmatrix} 4250.179 & 0.000 & 0.000 \\ 0.000 & 4250.179 & 0.000 \\ 0.000 & 0.000 & 4250.179 \end{bmatrix}$$

4.3 Simulazione di collisioni con Skyrme-Hartree-Fock

La simulazione di una collisione tra due nucleoni è calcolata sfruttando il TDHF, Time Dependent Hartree-Fock. Per risolvere al computer l'equazione differenziale del TDHF si sfrutta un metodo "*predictor corrector*", in cui sostanzialmente, per valutare la funzione d'onda allo step $t + \Delta t$, si calcola l'hamiltoniana a $\frac{\Delta t}{2}$, ($\hat{h}(t + \frac{\Delta t}{2})$) e con quest'ultima si calcola $\phi(t + \Delta t)$.

L'equazione di Hartree-Fock dipendente dal tempo può essere derivata dalla variazione dell'azione rispetto $\phi^*(t)$

$$\delta S = \delta \int \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(t) \left(i\hbar \partial_t - \hat{h} \right) \phi_{\alpha}(t) dt = 0 . \quad (54)$$

Si ottiene dunque

$$i\hbar \partial_t \phi_{\alpha} = \hat{h} \phi_{\alpha} . \quad (55)$$

Che è l'equazione di TDHF, nella quale \hat{h} , è l'hamiltoniana del campo medio della formula (47). Per determinare l'evoluzione temporale di uno stato di singola particella si sfrutta l'operatore di evoluzione temporale

$$\hat{U}(t, t + \Delta t) = \exp^{-\frac{i}{\hbar} \hat{h} \Delta t} , \quad (56)$$

$$\phi_{\alpha}(t + \Delta t) = \hat{U}(t, t + \Delta t) \phi_{\alpha}(t) . \quad (57)$$

Come già accennato in precedenza, in sky3d, per computare l'evoluzione temporale della funzione d'onda di singola particella si usa un algoritmo "*predictor corrector*".

Il primo step consiste nel valutare $\hat{h}(t + \frac{\Delta t}{2})$. Dato che l'hamiltoniana dipende dalle densità che sono calcolate a partire dalle funzioni d'onda, quindi, innanzitutto, è necessario stimare

$$\tilde{\phi}_{\alpha} = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{h} \Delta t \right) \phi_{\alpha}(t) . \quad (58)$$

A seguire la funzione d'onda $\tilde{\phi}_{\alpha}$ viene usata per il calcolo delle densità in prima approssimazione, cioè nella fase *predictor* $\rho_{predictor} = (\rho(t) + \tilde{\rho})/2$. Per completare il primo step si calcola $\hat{h}_{pre}(t + \frac{\Delta t}{2})$.

Al secondo step, poi, si corregge la $\tilde{\phi}_{\alpha}$ con l'hamiltoniana calcolata a metà intervallo Δt

$$\phi_{\alpha}(t + \Delta t) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{h}_{pre} \Delta t \right) \phi_{\alpha}(t) . \quad (59)$$

In appendice D si approfondisce il metodo *predictor-corrector*.

Il parametro, Δt , corrispondente all'intervallo di evoluzione temporale, deve essere piccolo in ordine di soddisfare l'autoconsistenza del sistema. Una buona scelta è Δt compreso

tra i 0.1 e $0.2\frac{fm}{c}$. In particolare nella simulazione effettuata si è preso $\Delta t = 0.2\frac{fm}{c}$. Un'altro fattore importante nel calcolo della $\phi_\alpha(t + \Delta t)$ è che il fattore esponenziale, nell'algoritmo, è valutato espanso in serie di Taylor di ordine m

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{h}\Delta t\right) = \sum_{n=0}^m \frac{(-i\Delta t)^n}{\hbar^n n!} \hat{h}^n \phi. \quad (60)$$

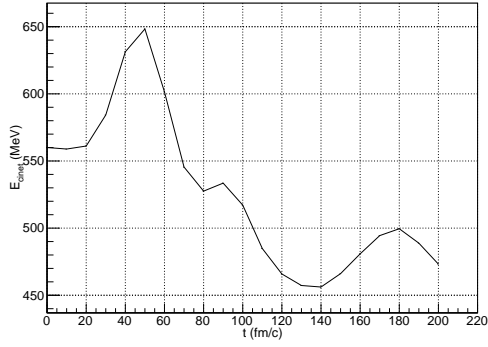
Un valore tipico per l'ordine di espansione m è tra 4 e 6 , un valore superiore a 6 renderebbe poco efficienti i calcoli.

4.3.1 Collisione $^{16}_8\text{O} + ^{16}_8\text{O}$

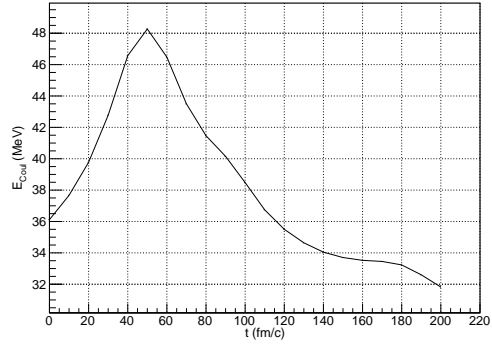
Tramite l'input file dell'appendice C si è studiata la collisione tra due nuclei di $^{16}_8\text{O}$. Un primo controllo sulla stabilità del codice si può effettuare controllando, nel file `energies.res`, il numero di protoni e neutroni del sistema durante la simulazione. Così come l'energia del totale, che rimane conservata.

<i>Tempo</i> ($\frac{fm}{c}$)	$N_{neutroni}$	$N_{protoni}$	<i>Energia</i> (MeV)
0.00	16.000	16.000	-133.3074922
10.00	16.000	16.000	-133.3093311
20.00	16.000	16.000	-133.2752991
30.00	16.000	16.000	-133.2799081
40.00	16.000	16.000	-133.3796208
50.00	16.000	16.000	-133.2450508
60.00	16.000	16.000	-133.2222964
70.00	15.999	15.999	-133.2780933
80.00	15.999	15.999	-133.3344583
90.00	15.999	15.999	-133.3054693
100.00	15.999	15.999	-133.2902020
110.00	15.999	15.999	-133.3266515
120.00	15.999	15.999	-133.3198075
130.00	15.999	15.999	-133.3044051
140.00	15.999	15.999	-133.2935649
150.00	15.999	15.999	-133.2789213
160.00	15.999	15.999	-133.2742729
170.00	15.999	15.999	-133.2905651
180.00	15.999	15.999	-133.2800673
190.00	15.999	15.999	-133.2739349
200.00	15.998	15.999	-133.2820086

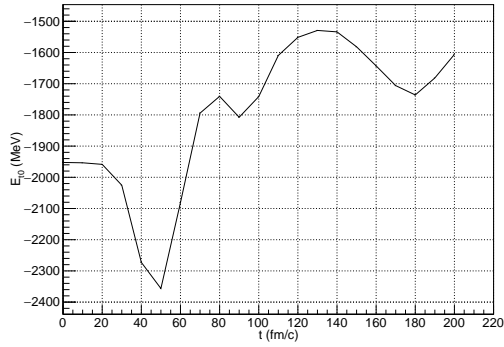
Nell'output standard, inoltre, ogni 50 iterazioni vengono scritti i valori delle varie componenti dell'energia, a partire dal termine centrale, dipendente da t_0 , fino al termine di Coulomb. Si ha dunque in totale sette componenti che variano durante l'evoluzione del sistema. Il termine centrale, i termini dipendenti dal momento con i parametri t_1 e t_2 , il termine dipendente dalla densità, con t_3 , il termine di spin-orbita con il parametro W_0 , il termine di Coulomb ed infine l'energia cinetica.



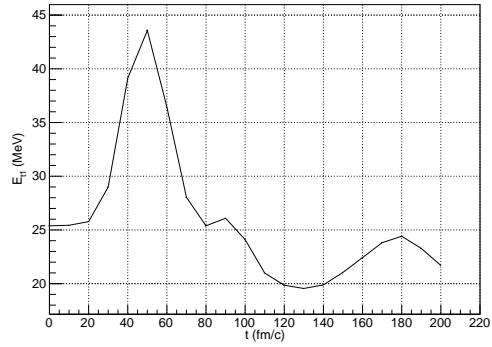
(a) *Energia cinetica.*



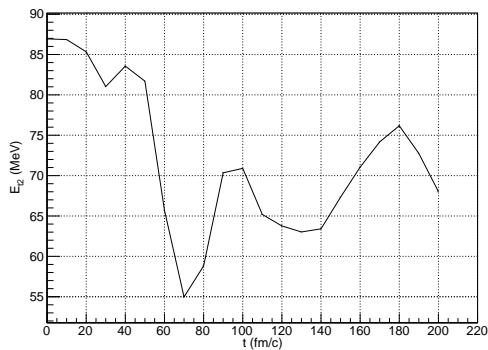
(b) *Termine di Coulomb.*



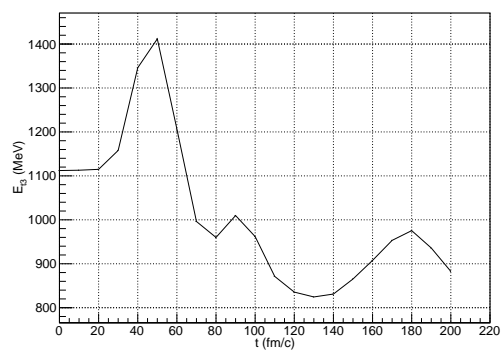
(c) *Termine centrale.*



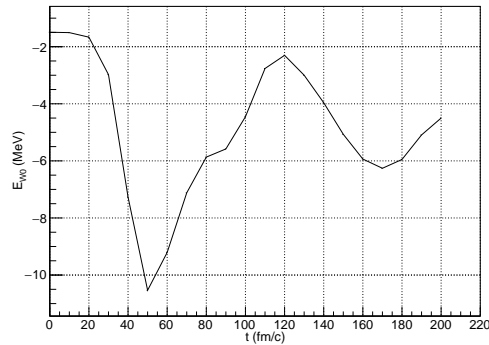
(d) *Termine dipendente dal momento.*



(e) *Termine dipendente dal momento.*



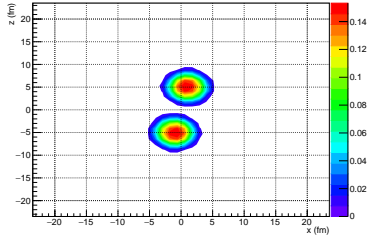
(f) *Termine dipendente dalla densità.*



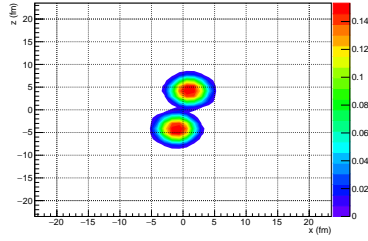
(a) Termine di spin-orbita.

Dai precedenti grafici si evince facilmente in quale momento avvenga l'urto. Per esempio l'energia cinetica ha un picco a $50 \frac{fm}{c}$, mentre subito dopo decresce rapidamente a causa della natura inelastica della collisione. Così anche il termine di Coulomb avrà un massimo quando i due nuclei saranno il più vicino possibile. Il termine di spin-orbita ed il termine dipendente da t_0 sono gli unici due che apportano un contributo negativo all'energia. L'andamento di questi contributi dipende anche dal set di parametri dell'interazione scelto, in questo caso, come riportato nelle appendici B e C, il set è "SV-bas" attribuito alla variabile **name** della namelist **&force**.

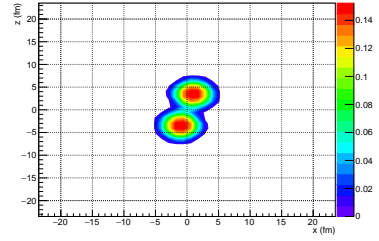
Sfruttando, di nuovo, il codice "cuts" si è ottenuta la densità sulla griglia nella quale si svolge la simulazione. Questo è molto utile per visualizzare graficamente la collisione. Di seguito si forniscono i grafici della densità sul piano (x,z), sul quale avviene l'urto.



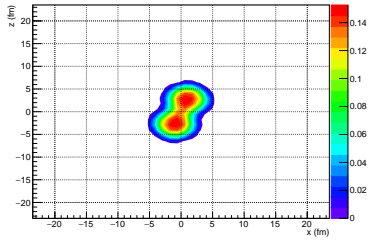
(a) densità radiale nell'istante iniziale.



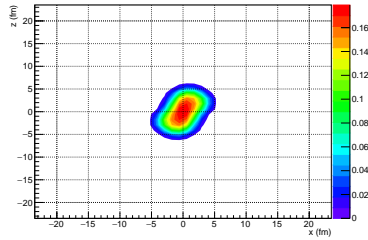
(b) nuclei dopo $10 \frac{fm}{c}$.



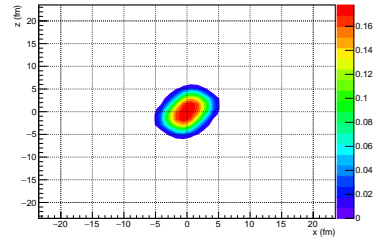
(c) nuclei dopo $20 \frac{fm}{c}$.



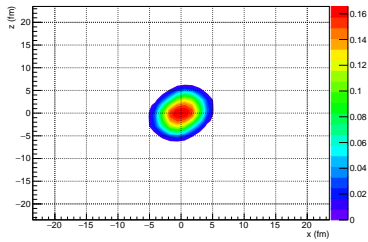
(d) nuclei dopo $30 \frac{fm}{c}$.



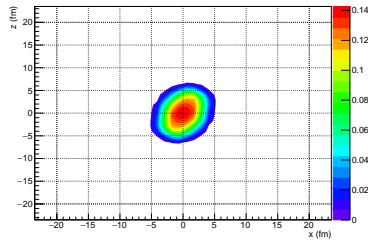
(e) nuclei dopo $40 \frac{fm}{c}$.



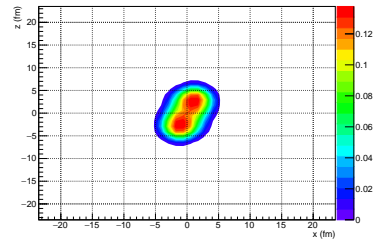
(f) nuclei dopo $50 \frac{fm}{c}$.



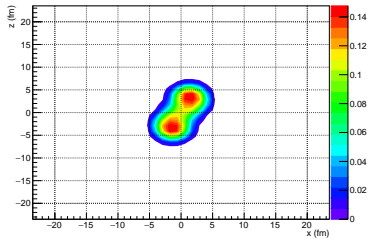
(g) nuclei dopo $60 \frac{fm}{c}$.



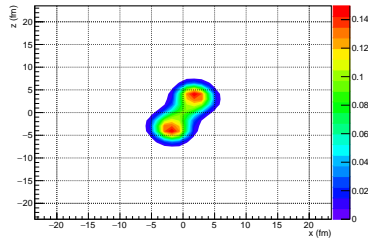
(h) nuclei dopo $70 \frac{fm}{c}$.



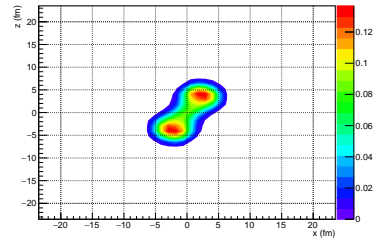
(i) nuclei dopo $80 \frac{fm}{c}$.



(j) nuclei dopo $90 \frac{fm}{c}$.



(k) nuclei dopo $100 \frac{fm}{c}$.



(l) nuclei dopo $110 \frac{fm}{c}$.

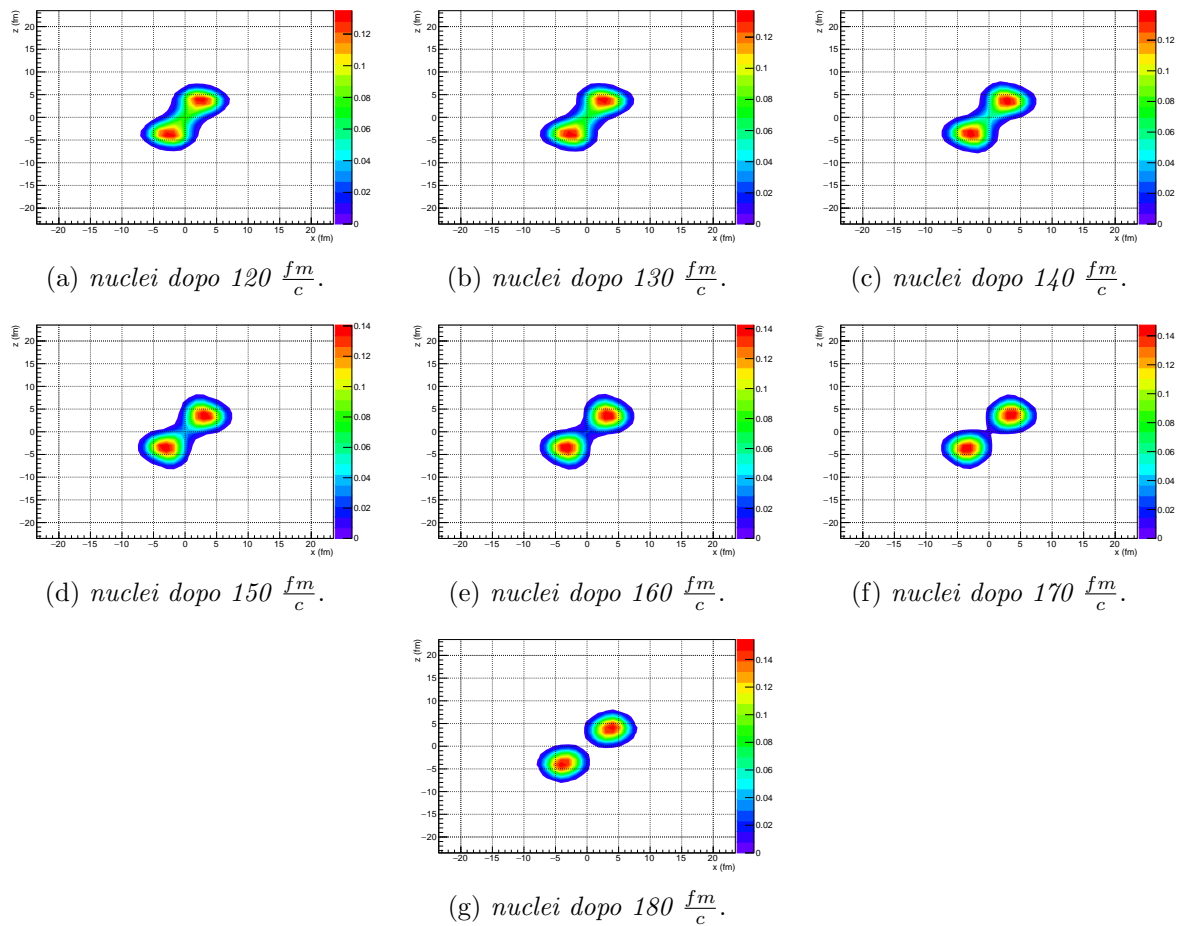


Figura 21: Plot del contorno della densità dei due nuclei di $^{16}_8O$ dopo ogni 50 iterazioni, corrispondenti a $10 \frac{fm}{c}$, ad un'energia del centro di massa $E_{cm} = 100(MeV)$. La densità è raffigurata sul piano (x,z), poiché l'urto avviene su questo. Sulla destra la scala della densità ρ in (fm^{-3})

Dai grafici soprastanti si nota molto bene l'evoluzione del sistema; appare chiaro che a $60 \frac{fm}{c}$ i due nuclei si trovano uniti, per poi separarsi. Si nota, come ci si può aspettare, che nello stato in cui i due nuclei si sovrappongono la scala della densità aumenta, avendo un picco più alto.

In questa collisione, fornita l'energia del centro di massa e il parametro d'urto, viene applicato un boost ai due nuclei, le cui velocità iniziali diventano.

$$\vec{v}_1 = (-0.755464E - 03, \quad 0.0, \quad 0.778129E - 01) c$$

$$\vec{v}_2 = (0.755464E - 03, \quad 0.0, \quad -0.778129E - 01) c$$

Infine si può verificare come il centro di massa del sistema resti fisso nell'origine, ottenendo i dati dall'output file `dipole.res`. Ovviamente, per i valori delle coordinate del centro di massa, non si ha esattamente zero, ma, in buona approssimazione, si può considerare il centro di massa fisso nell'origine, come mostrato dalla tabella seguente.

<i>tempo</i> ($\frac{fm}{c}$)	x_{cm} (<i>fm</i>)	y_{cm} (<i>fm</i>)	z_{cm} (<i>fm</i>)
0	$-0.7541E - 14$	$-0.7827E - 15$	$0.1475E - 13$
50	$-0.7220E - 14$	$-0.7918E - 15$	$0.1641E - 13$
100	$-0.6723E - 14$	$-0.8664E - 15$	$0.8309E - 14$
150	$-0.6694E - 14$	$-0.8659E - 15$	$0.4092E - 14$
200	$-0.6948E - 14$	$-0.1026E - 14$	$-0.5726E - 15$
250	$-0.7048E - 14$	$-0.1068E - 14$	$-0.4715E - 14$
300	$-0.6834E - 14$	$-0.1133E - 14$	$-0.1013E - 13$
350	$-0.6668E - 14$	$-0.1292E - 14$	$-0.1437E - 13$
400	$-0.6540E - 14$	$-0.1443E - 14$	$-0.1875E - 13$
450	$-0.6480E - 14$	$-0.1618E - 14$	$-0.2431E - 13$
500	$-0.6874E - 14$	$-0.1643E - 14$	$-0.2743E - 13$
550	$-0.7323E - 14$	$-0.1867E - 14$	$-0.3328E - 13$
600	$-0.7240E - 14$	$-0.2147E - 14$	$-0.3867E - 13$
650	$-0.7234E - 14$	$-0.2252E - 14$	$-0.4422E - 13$
700	$-0.5955E - 14$	$-0.2533E - 14$	$-0.4581E - 13$
750	$-0.8178E - 14$	$-0.2759E - 14$	$-0.5308E - 13$
800	$-0.8788E - 14$	$-0.2943E - 14$	$-0.5689E - 13$
850	$-0.9374E - 14$	$-0.3201E - 14$	$-0.6330E - 13$
900	$-0.6479E - 14$	$-0.3498E - 14$	$-0.6677E - 13$
950	$-0.8192E - 14$	$-0.3727E - 14$	$-0.7422E - 13$
1000	$-0.6877E - 14$	$-0.4060E - 14$	$-0.7782E - 13$

5 Conclusioni

L'interazione effettiva di Skyrme è lo strumento più utile per lo studio del nucleo atomico. Sebbene il metodo di Hartree-Fock trovi largo utilizzo in vari campi, inglobando l'interazione di Skyrme si può andare a studiare i vari componenti del nucleo atomico; anche grazie a codici che implementano tale metodo. In questo lavoro non si è studiato l'intero funzionale di Skyrme, poiché il termine di tensore non è implementato in sky3d. Tuttavia si sono riusciti a studiare vari nuclei fino al $^{208}_{82}Pb$.

Si sono analizzati i livelli energetici dei nucleoni nello stato fondamentale, plottata la densità del nucleo in funzione del raggio e valutata la forma in base ai parametri di deformazione. Un accurato studio delle proprietà statiche del nucleo è fondamentale come punto di partenza per successivi studi dinamici, quali collisioni ed eccitazioni da un campo esterno. Per sviluppare una descrizione più accurata dello stato fondamentale saranno necessarie in futuro delle parametrizzazioni più precise che tengano conto anche del termine di tensore. A seguire si è simulata la collisione simmetrica tra due nuclei di $^{16}_8O$ con energia al centro di massa di 100 MeV. In tale collisione non si osserva la fusione tra i due nuclei, ma un urto.

Lo studio di nuclei atomici è importante per varie applicazioni, tra queste varie anche mediche. Per esempio ai laboratori di Legnaro, nell'esperimento SPES (Selective Production of Exotic Species), si studia la produzione di radionuclei per applicazioni nel campo medico.

A Appendice: densità

Densità locali per definire i termini dell'energia. partendo dalla definizione degli elementi di matrice

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\sigma, q} \rho_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma) = \sum_{i, \sigma, q} \phi_i^*(\mathbf{r}', \sigma, q) \phi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)$$

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\sigma, \sigma', q} \rho_q(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma') \langle \sigma' | \hat{\sigma} | \sigma \rangle = \sum_{i, \sigma, \sigma', q} \phi_i^*(\mathbf{r}', \sigma', q) \hat{\sigma} \phi_i(\mathbf{r}, \sigma, q)$$

si possono ottenere da queste sette densità locali, quali: la densità di particelle $\rho(\mathbf{r})$, la densità cinetica $\tau(\mathbf{r})$, la densità vettoriale di spin $\mathbf{S}(\mathbf{r})$, la densità vettoriale spin-cinetica $\mathbf{T}(\mathbf{r})$, la densità vettoriale di corrente $\mathbf{j}(\mathbf{r})$, la densità tensoriale spin-corrente $J_{\mu\nu}(\mathbf{r})$ e la densità tensore-cinetica $\mathbf{F}(\mathbf{r})$.

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \\ \tau(\mathbf{r}) &= \nabla \cdot \nabla' \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \\ \mathbf{S}(\mathbf{r}) &= \mathbf{S}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \\ \mathbf{T}(\mathbf{r}) &= \nabla \cdot \nabla' \mathbf{S}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= -\frac{i}{2} (\nabla - \nabla') \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \\ J_{\mu\nu}(\mathbf{r}) &= -\frac{i}{2} (\nabla_\mu - \nabla'_\mu) S_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \\ F_\mu(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2} \sum_{\nu=x}^z (\nabla_\mu \nabla'_\nu + \nabla'_\mu \nabla_\nu) S_\mu(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \end{aligned}$$

Dove nell'ultima formula μ e ν rappresentano le coordinate x, y, z .

Di queste densità si ha che $\rho(\mathbf{r})$, $\tau(\mathbf{r})$ e $J_{\mu\nu}(\mathbf{r})$ sono pari, mentre $\mathbf{S}(\mathbf{r})$, $\mathbf{T}(\mathbf{r})$, $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ e $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ sono dispari.

B Appendice: file di input static

Di seguito si fornisce il codice del file di input usato per la simulazione del ground-state del nucleo di $^{16}_8\text{O}$.

```
&files wffile='016' /
&force name='SV-bas', pairing='NONE' /
&main mprint=100,mplot=100,
  mrest=100,writeselect='r',
  imode=1,tfft=T,nof=0 /
&grid nx=24,ny=24,nz=24,dx=1.0,dy=1.0,dz=1.0,
  periodic=F /
&static nprot=8, nneut=8,
  radinx=3.1,radiny=3.1,radinz=3.1,
  x0dmp=0.40,e0dmp=100.0,tdiag=T,tlarge=F,
  maxiter=2000,serr=1D-6 /
```

Per gli altri nuclei basta cambiare `nprot` con il numero di protoni desiderato e `nneut` con quello dei neutroni.

C Appendice: file di input dynamic

Per inizializzare la simulazione di una collisione tra due nuclei di $^{16}_8O$ si è usato il seguente file di input.

```
&files wffile='Restart' /
&force name='SV-bas', pairing='NONE' /
&main tcoul=T,mprint=50,mplot=50,
mrest=100,writeselect='r',
imode=2,tfft=T,nof=2 /
&grid nx=48,ny=24,nz=48,dx=1.0, periodic=F /
&dynamic nt=1000, dt=0.2, rsep=16 /
&fragments filename=2*'[.]/8p_8n_ossigeno/016', ecm=100, b=2, fix_boost=F,
fcent(1,1)=-1,0,-5, fcent(1,2)=1,0,5 /
```

I parametri importanti sono: nella namelist dynamic; **nt** indica il numero di iterazioni dell'algoritmo da computare, **dt** è lo step di tempo ad ogni iterazione e infine **rsep** è un controllo sull'evoluzione temporale, ossia, in questo caso, se la distanza tra il centro dei due nuclei raggiunge un valore superiore a 16 fm, la simulazione si interrompe. In questo caso l'intervallo temporale è $dt = 0.2 \frac{fm}{c}$, corrispondente a circa $10^{-22} s$. Altre variabili importanti sono, il percorso del file contenente le funzioni d'onda dei nuclei di cui si voglia studiare la collisione, **filename**; l'energia del centro di massa, **ecm**; il parametro d'urto, **b** e le due posizioni dei centri dei due nuclei, **fcent(1, i)**. **fix_boost = F** sta ad indicare, semplicemente, che la quantità di moto dei due nuclei è calcolata usando l'energia del centro di massa e il parametro d'urto.

D Appendice: metodo predictor-corrector

Come descritto in [12]. Al fine di poter risolvere numericamente un'equazione differenziale si possono usare vari metodi, quello usato nel codice Sky3D, per risolvere il TDHF, è un metodo che rientra nella tipologia del *predictor-corrector*. Anche se questo metodo è caduto un po' in disuso e hanno preso spazio metodi come quello Runge-Kutta, ha comunque avuto un largo utilizzo negli anni passati e è usato tutt'ora in alcuni programmi, tra i quali Sky3D usato in questo elaborato.

Data un'ODE (Ordinal differential Equation), della forma

$$y' = f(x, y) . \quad (61)$$

in un metodo a multistep, quale il predictor-corrector si estrapola il valore della variabile y allo step $n + 1$, usando i precedenti valori dell'iterazione. Nella fase predictor si avrà quindi una soluzione del tipo

$$y_{n+1}^{pre} = y_n + h (\alpha_1 y'_n + \alpha_2 y'_{n-1} + \alpha_3 y'_{n-2} + \dots) . \quad (62)$$

L'ordine del metodo corrisponde al numero di valori precedenti usati per determinare il valore allo step $n+1$. A seguire si ha la fase corrector, nella quale si interpola il valore appena ottenuto di y_{n+1}^{pre} con quelli precedenti per ottenere il valore corretto di y_{n+1} . Si ha quindi

$$y_{n+1} = y_n + h (\beta_0 y_{n+1}^{pre} + \beta_1 y'_n + \dots) \quad (63)$$

Si va ora ad analizzare la procedura usata nel codice del programma sfruttando la struttura del metodo predictor-corrector. Innanzitutto si valuta con l'equazione (58) la funzione d'onda in prima approssimazione con un passo Δt . In modo da poter calcolare nella fase predictor le varie densità e quindi l'hamiltoniana \hat{h}_{pre} . A seguire nella fase corrector si sfrutta la stessa hamiltoniana \hat{h}_{pre} per valutare lo step corrector della funzione d'onda dopo Δt , dall'equazione (59). A seguire vengono reiterati questi due passaggi, tenendo conto che il valore della funzione esponenziale è valutato dall'espansione in serie di Taylor come da equazione (60).

Riferimenti bibliografici

- [1] P. Ring, P. Schuck (1980), *The nuclear many-body problem*, Springer.
- [2] J. M. Eisenberg, W. Greiner, *Microscopic Theory of the Nucleus*, North Holland.
- [3] E. K. U. Gross, E. Runge, O. Einonen (1991) *Many-Particle Theory*, Adam Hilger.
- [4] D. Vautherin, D. M. Brink, *Hartree-Fock Calculations with Skyrme's Interaction*, Physical Review C, **5**, (1972) pag. 626.
- [5] E. B. Suckling (2011), *Nuclear Structure and Dynamics from the Fully Unrestricted Skyrme-Hartree-Fock Model* Ph.D. Thesis, University of Surrey.
- [6] K. Bennaceur, J. Dobaczewski, *Coordinate-space solution of the Skyrme-Hartree-Fock-Bogolyubov equations within spherical symmetry*, Computer Physics Communications **16**, (2005) pag 96.
- [7] J. R. Stone, P.-G. Reinhard (2006), *The Skyrme Interaction in finite nuclei and nuclear matter*, "https://arxiv.org/abs/nucl-th/0607002v1".
- [8] J. A. Marhun, P.-G. Reinhard, P. D. Stevenson, A. S. Umar (2014), *The TDHF Code Sky3D* "https://arxiv.org/pdf/1310.5946.pdf".
- [9] G.Audi, M.Wang, A.H.Wapstra, F.G.Kondev, M.MacCormick, X.Xu, and B.Pfeiffer, *The Ame2012 atomic mass evaluation*, Chinese Physics C, **36**, (2012) pag. 1287.
- [10] H.De Vries, C.W.De Jager, C.De Vries, *Nuclear charge-density-distribution parameters from elastic electron scattering*, Atom and Nuclear Data Tab. 36, (1988) pag.495.
- [11] E.G.Nadjakov, K.P.Marinova, Yu.P.Gangrsky, *Systematics of nuclear charge radii*, Atom and Nuclear Data Tab. 56, (1994) pag.133.
- [12] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery *Numerical Recipes in C*.