

LABORATORIO DE FISICA COMPUTACIONAL

DEPARTAMENTO DE FISICA TEORICA I

PRACTICA DE LABORATORIO DE LA ASIGNATURA "Estructura de la Materia"

**EL POTENCIAL DE WOODS-SAXON EN FISICA NUCLEAR**

**Modelo del gas de Fermi**

Victor Weisskopf fue el primero en señalar que existe una explicación simple de cómo los nucleones se pueden mover independientemente a través del núcleo en su estado fundamental. La explicación se basa en el modelo del *gas de Fermi del núcleo*. Este modelo es esencialmente igual al modelo de gas de electrones libres para los electrones de conducción en un metal. Supone que cada nucleón del núcleo se mueve en un *potencial neto* atractivo que representa el efecto promedio de sus interacciones con otros nucleones en el núcleo. El potencial neto posee una profundidad aproximadamente constante dentro del núcleo ya que la distribución de nucleones es constante en esa región; fuera del núcleo cae a cero rápidamente como estimaremos a continuación.

Como ejemplo de potencial neto tomaremos el llamado *potencial de Woods-Saxon*  $V(r)$  dado por

$$V(r) = - \frac{V_0}{1 + e^{\left(\frac{r-R}{a}\right)}}$$

donde  $V_0$  representa la profundidad del pozo efectivo,  $R$  es una medida de la anchura del pozo y  $a$  representa una medida de la extensión de la región que separa el interior del exterior del pozo.

El pozo tiene simetría esférica y  $r$  es la coordenada radial.

Una buena parametrización del radio  $R$  del núcleo resulta ser la siguiente, en unidades fm:

$$R = 1.25 \text{ fm } A^{\left(\frac{1}{3}\right)}$$

Para tener una idea de la forma de este tipo de pozo, podemos usar la función Plot de Maple para dibujarlo

```
[ > restart;
  > Pot0WS := (U0,A,a,r) -> -U0/(1+exp((r-1.25*A^(1/3))/a));

[ > plot(Pot0WS(2.4,80,0.524,r), r=0..8,title=`Potencial de
  Woods-Saxon V(r)`,titlefont=[HELVETICA,BOLDOBLIQUE,10]);
```

En el estado fundamental del núcleo, sus nucleones, todos fermiones con espín  $S=1/2$ , ocupan los niveles de energía del potencial neto, de modo tal que minimizan la energía total sin violar el principio de exclusión.

Como los protones son distinguibles de los neutrones, el principio de exclusión opera independientemente en los dos tipos de nucleones y se debe imaginar un diagrama separado e independiente que represente los estados cuánticos llenos de cada especie.

## Modelo de Capas

El modelo del gas de Fermi establece la validez de tratar el movimiento de los nucleones ligados en un núcleo, en términos del movimiento independiente de cada nucleón en un potencial nuclear neto.

Se ha de resolver la ecuación de Schrödinger en ese potencial y obtener una descripción detallada del comportamiento de los nucleones. Este procedimiento es el empleado en el **modelo de capas del núcleo**. El modelo de capas tiene una función en la física nuclear comparable a la que tiene la teoría de Hartree en la física atómica. Sin embargo, el modelo de capas es más rígido ya que la forma exacta del potencial atómico neto se determina internamente mediante la teoría atómica autoconsistente, mientras que la forma exacta del potencial nuclear neto es, por ahora, insertada ad-hoc en el modelo nuclear. En nuestro caso, este potencial efectivo es el de **Woods-Saxon**.

La ecuación de Schrödinger radial independiente del tiempo para un potencial esféricamente simétrico se puede escribir como:

$$-u''(r) + U(r)Lu(r) = \epsilon u(r)$$

donde L es el momento angular orbital y

$$u(r) = r R(r)$$

$$U(r,L) = 4\pi^2 \frac{2m}{h^2} V(r) + \frac{L(L+1)}{r^2}$$

$$\epsilon = E - 4\pi^2 \frac{2m}{h^2}$$

El potencial radial efectivo  $U(r,L)$  incluye la contribución del término centrífugo que depende del momento angular. De nuevo podemos ver la forma de este potencial:

```
> restart;
> PotWS := (U0,A,a,L,r) -> -U0/(1+exp((r-1.25*A^(1/3))/a)) + L*(L+1)/r^2;
> plot(PotWS(2.4,80,0.524,1,r), r=0.4..18,title=`Potencial de Woods-Saxon V(r,L)`,titlefont=[HELVETICA,BOLDOBLIQUE,10]);
```

Por fin, considere la inclusión de un potencial L.S (propuesto en este contexto por Mayer y Jensen). En base a consideraciones relativistas tomemos un potencial del tipo

$$V_{SO}(r,L,S) = \frac{C_{SO}}{r} \frac{dV(r)}{dr} L \cdot S$$

donde  $C_{SO}$  es una constante por determinar. El valor esperado del operador  $L \cdot S$  en un estado autovector de  $L, S, J, J_z$  viene dado por

$$\langle LS \rangle = \frac{1}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1))$$

Como orientación para obtener  $C_{SO}$  hay un resultado empírico debido a Bohr y Mottelson que da el desplazamiento relativo de subcapas en MeV:

$$\Delta E = E(j = l - \frac{1}{2}) - E(j = l + \frac{1}{2}) = 10 (2l+1) A^{-\frac{2}{3}}$$

## RESOLUCION NUMERICA DE LA ECUACION DE SCHRODINGER RADIAL

Para obtener las energías de los estados ligados necesitamos resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger radial para el potencial de Woods-Saxon.

Existen varios métodos de resolución numérica y en nuestro caso tomaremos uno de los más simples:

**el método de diferencias finitas.**

Este método consiste en discretizar la ecuación diferencial convirtiéndola en una ecuación en diferencias finitas. Esto se consigue haciendo que la posición  $r$  de la partícula tome valores discretos

$$r_i = h \times i, \quad i=0, 1, 2, \dots, N+1$$

donde  $N$  es el número de sitios permitidos y  $h$  es espaciado de la discretización (red). Así la partícula queda confinada a una caja de tamaño:

$$\text{Lambda} = r_{N+1} - r_0 = (N+1) h.$$

Con esta discretización, el Hamiltoniano  $H$  se convierte en una matriz  $N \times N$  cuyos elementos son los siguientes:

$$H_{i,j} = \begin{cases} 2/h^2 + V_i & \text{si } i=j \\ -1/h^2 & \text{si } |i-j|=1 \\ 0 & \text{resto} \end{cases}$$

donde  $V_i = V(r_i)$ , y por tanto  $H$  es tridiagonal:

$$\begin{bmatrix} \frac{2}{h^2} + V_1 & -\frac{1}{h^2} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2} + V_2 & -\frac{1}{h^2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2} + V_{N-1} & -\frac{1}{h^2} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2} + V_N \end{bmatrix}$$

La ecuación de Schrödinger discretizada se lee:  $H_{ij} u_j = \epsilon u_i$ , con  $i, j=1, \dots, N$  y condiciones de contorno:  $u_0 = u_{N+1} = 0$ .

Uno puede recuperar la ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano tomando el límite al continuo haciendo

$h \rightarrow 0$ ,  $N \rightarrow \text{infinity}$ , con  $\text{Lambda}=(N+1)h$  fijo,

y haciendo finalmente **Lambda tender a infinity**.

**Nota:** no confunda el  $h$ , paso de la discretización, con la constante de Planck!

Este simple algoritmo se implementa en un procedimiento Maple más abajo. En él se discretiza el Hamiltoniano de **Woods-Saxon** y se diagonaliza. Se obtiene pues una aproximación a los niveles de energía de los nucleones. El procedimiento admite como parámetros iniciales los siguientes datos:

**N:** número de puntos de la red.

**Lambda:** tamaño de la caja

**L:** momento angular orbital.

**$V_0$ ,  $A$ ,  $a$ :** parámetros del potencial de Woods-Saxon.

El procedimiento (subrutina) devuelve los siguientes datos:

**Primero:** energías ordenadas de menor a mayor.

**Segundo:** energías negativas y sus correspondientes funciones de onda (discretizadas).

**Tercero:** gráficas de las densidades de probabilidad radiales  $2 \times 2(2L+1) |r^2 R^2(r)|$  para un  $L$  fijo.

```
[> restart;
```

```
[> with(linalg):
```

```
> schro3dWS := proc(N,Lambda,L,U0,A,a)
    local i,j,Pot,Z,H,energ,vects,u,l,lv,m,h;
    h:=Lambda/(N+1);
    Z:= array(1..N) :for i from 1 to N do
    Z[i]:= i
    od;
    Pot := array(1..N):
    for i from 1 to N do
    Pot[i]:=(-U0/(1 + exp((h*Z[i]-1.25*A^(1/3))/a))+L*(L+1)/(h*Z
    [i])^2)
    od;
    H := array(1..N,1..N):
    for i from 1 to N do
    for j from 1 to N do
    if(i=j) then
```

```

H[i,j]:= 2/h^2 + Pot[i]
elif((j=i+1) or (j=i-1)) then
H[i,j]:= -1/h^2
else
H[i,j]:=0
fi
od
od;
H:=convert(H,matrix);
energ:=evalf(Eigenvals(H));
energ:=evalm(energ);
print(`ENERGIAS: ESTADOS LIGADOS Y DE SCATTERING`);
print(energ);                                vects:=
evalf(eigenvects(H));
u:=1 -> [vects[1,3,1][m] $m=1..N];           for j from
1 to N do                                     if(vects[j,1]<0) then
print(`ESTADO LIGADO: ENERGIA Y
DENSIDAD DE PROBABILIDAD`);
print(vects[j,1]);                            lv:=[
[evalf(k*h),2*2*(2*L+1)*(u(j)[k])^2] $k=1..N];
# print(lv);
print(plot(lv,`r`,title=`Densidad de Probabilidad Radial rho
(n,L)`,titlefont=[HELVETICA,BOLDOBLIQUE,10]))
fi;
od;
end:

```

```
> schro3dWS(100,20,0,2.394,80,0.524);
```

## EJERCICIOS PROPUESTOS

1) Utilice las funciones Pot0WS y PotWS para el potencial de **Woods-Saxon**, pasándoles diversos valores de los parámetros  $U_0$ , A, a, L para comprobar que la interpretación de estos parámetros es la indicada en el texto (10 minutos). Determine gráficamente el valor del alcance del potencial para los valores de los parámetros que se dan en el apartado siguiente. Ayuda: esta información es útil para estimar el valor **Lambda** del tamaño de la discretización que hay que usar para la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger.

2) Consideremos un núcleo hipotético con números de protones y neutrones **Z = A-Z = 40**. Tomemos como parámetros para el potencial de **Woods-Saxon** los siguientes:

$$V_0 = 50 \text{ MeV} \quad a = 0.524 \text{ fm}$$

La constante de Planck en estas unidades es  $\frac{h}{2\pi} = 197.328 \text{ MeV fm}$ .

Se pide usar la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger radial dada por la subrutina Maple llamada **schro3dWS(N, Lambda, L, U0, A, a)** para obtener el estado fundamental de este núcleo de acuerdo con el modelo de capas. Para ello se necesita calcular las energías de los nucleones y su distribución por niveles: Obtenga una tabla con esta distribución de niveles con sus energías y números cuánticos.

**EJEMPLO DE TABLA**

ENERGIA	L(mom. ang.)	N(#sitios del reticulo)	Lambda
=====	=====	=====	=====
-2.016	0	64	20

He aquí el valor de U0 en fm<sup>-2</sup> que se le pasa al potencial:

```
[> 50*938*2/(197.328^2);
```

**NOTA:** exprese las energías en MeV.

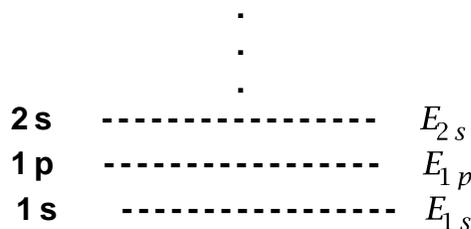
**Recomendación:** tome un N no superior a 256 para no invertir demasiado tiempo en el cálculo.

**NOTA:** este cálculo es muy ingenuo por varias razones, entre ellas porque *no se tiene en cuenta la interacción espín-órbita nuclear o la atracción* entre pares.

**3)** Dibuje el esquema de niveles que resulta de llenar los 40 protones de acuerdo con los resultados de 2).

Use la notación **n<sub>r</sub>, L** para denotar un nivel de energía, donde **n<sub>r</sub>** es el número cuántico radial y **L** el de momento angular.

Ejemplo:



**4) i)** ¿Cuál es el valor **máximo** de **L** para el cuál encuentra estados ligados?

ii) ¿Cuál es el valor **máximo** de  $n_r$  (num. radial, no principal) que puede tener un protón o un neutrón en el presente núcleo con  $A=80$ ?

iii) Calcule la energía promedio de ligadura para un nucleón, y la necesaria para arrancar uno de la última capa ocupada. ¿Son realistas? ¿Cómo se puede mejorar el resultado?

iv) ¿Se obtienen los nums. mágicos 28 y 50?

**5) Consideremos ahora la interacción espín-órbita nuclear.** Repita los ejercicios precedentes teniendo en cuenta este añadido al potencial. Para ello considere el siguiente programa con un argumento adicional,  $J$ , que debe ser uno de los dos posibles momentos angulares totales resultantes de combinar  $L$  con el espín  $1/2$  del nucleón, y un segundo argumento  $Cs\alpha$ , la constante que hemos dejado libre. Decida el signo de esta constante y tome un valor num. aproximado que proporcione el orden de magnitud correcto para la fórmula de Bohr-Mottelson dada antes, con  $l=1$ .

¿Se obtienen los nums. mágicos 28 y 50?

```
[ > restart;
  with(linalg):

[ > schro3dWS := proc(N,Lambda,L,Jang,U0,A,a,Cso)      local i,j,
Pot,Z,H,energ,vects,u,l,lv,m,rr,h;
if(Jang=L-1/2 or Jang=L+1/2) then
  h:=Lambda/(N+1); Z:= array(1..N) :
  for i from 1 to N do
    Z[i]:= i
  od;
  Pot := array(1..N):
  for i from 1 to N do
    rr:=h*Z[i]:
    Pot[i]:=(-U0/(1 + exp((rr-1.25*A^(1/3))/a))+L*(L+1)/rr^2) +
    Cso*(1/2)*(Jang*(Jang+1)-L*(L+1)-(3/4))*(1/rr)*U0/(1 + exp(
      (rr-1.25*A^(1/3))/a ))^2*exp((rr-1.25*A^(1/3))/a)/a;
  od;
  H := array
  (1..N,1..N):
  for i from 1 to N do
    for j from
  1 to N do
    if(i=j) then
      H[i,j]:= 2/h^2 + Pot[i]
    elif((j=i+1) or (j=i-1)) then
      H[i,j]:= -1/h^2
    else
      H[i,j]:=0
    fi
  od
od;
H:=convert(H,matrix);
```

```

energ:=evalf(Eigenvals(H));
energ:=evalm(energ);
print(`ENERGIAS: ESTADOS LIGADOS Y DE SCATTERING`);
print(energ);
evalf(eigenvects(H));
u:=1 -> [vects[1,3,1][m] $m=1..N];
for j from 1 to N do
  if(vects[j,1]<0) then
    print(`ESTADO LIGADO Y DENSIDAD DE PROBABILIDAD`);
    print(vects[j,1]);
    lv:=[evalf(k*h),2*2*(2*L+1)*(u(j)[k])^2] $k=1..N];
    #print(lv);
    print(plot(lv,`r`,title=`Densidad de Probabilidad Radial
rho(n,L)`,titlefont= [HELVETICA,BOLDOBLIQUE,10]))
  fi;
od;
else
print("error: J-L distinto de +- 1/2");
fi;
end:

> schro3dWS(60,25,0,0.5,2.394,80,0.524,-0.1);

```

**ESPACIO PARA LA RESOLUCION DE LOS EJERCICIOS**