Fisica Computazionale: Esercitazione 2

1 Integrazione Numerica

1. implementa un codice per effettuare l'integrazione numerica sia con il metodo dei trapezi che con quello di Simpson dei seguenti integrali

   (a) $\int_0^A dx \sin^2(\alpha x)$

   (b) $\int_0^A dx x^2 \sin^2(\alpha x)$

   (c) $\int_B^\infty dx e^{-\beta x}$

   (d) $\int_B^\infty dx x^2 e^{-\beta x}$

   - suggerimenti
     (a) verifica la corretta implementazione dei due metodi usando dei polinomi come integrandi sfruttando il risultato analitico
     (b) per gli integrali da B a ∞ potete usare i seguenti risultati analitici per mappare gli integrali su un dominio finito
        i. $\int_0^\infty dx e^{-\beta x} = \frac{1}{\beta}$
        ii. $\int_0^\infty dx x^2 e^{-\beta x} = \frac{2}{\beta^3}$

2. nel caso $A = B = 1$, $\alpha = 2$ e $\beta = 0.5$, determina per entrambi i metodi il numero di punti che garantisce un errore rispettivamente di 10^{-4} o 10^{-6} e calcola il valore degli integrali per questa scelta.

2 Modello semplice per il nucleo deuterio

Il deuterio é lo stato legato di un neutrone e un protone con un energia di legame $E \approx -2.224$ MeV. In questo esercizio considereremo un modello molto semplice per questo nucleo e useremo gli algoritmi per la risoluzione di equazioni non lineari e di integrazione numerica per calcolare le sue proprietá.

Andando nel centro di massa, l'equazione di Schrödinger per la funzione d'onda relativa $\Psi(\vec{r})$ puó essere scritta come

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \ , \tag{1}$$

dove $V(\vec{r})$ é il potenziale nucleare e μ la massa ridotta

$$\mu = \frac{M_n M_p}{M_n + M_p} \quad M_n c^2 = 939.565\text{MeV} \quad M_p c^2 = 938.272\text{MeV} \ . \tag{2}$$

Consideriamo un modello semplice del potenziale nucleare dato da

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} -V_0 & |\vec{r}| \leq R \\ 0 & |\vec{r}| > R \end{cases} \tag{3}$$

con $V_0 > 0$ una costante e R il raggio dell'interazione nucleare. Se cerchiamo la soluzione in onda s ($l = 0$), la parte angolare é data da $\mathcal{Y}_{00}(\Omega)$ e la funzione d'onda relativa puó essere scritta quindi come

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r}\mathcal{Y}_{00}(\Omega) \ , \tag{4}$$

dove abbiamo indicato $|\vec{r}| = r$. Usando il fatto che l'autovalore per uno stato legato é negativo e le condizioni al contorno $u(0) = u(\infty) = 0$, troviamo la soluzione (valida per $V_0 + E > 0$)

$$u(r) = \begin{cases} Asin(kr) & r \leq R \\ Be^{-qr} & r > R \end{cases} \quad k^2 = \frac{2\mu(V_0 + E)}{\hbar^2} \quad q^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} \ , \tag{5}$$

con A, B constanti. La funzione d'onda deve essere continua e differenziabile a $r = R$ e questo risulta nella condizione

$$\cot(kR) = -\frac{q}{k} \ . \tag{6}$$

1. riscrivi la soluzione usando variabili adimensionali usando R come scala per le distanze e $\lambda = \hbar^2/(2\mu R^2)$ come scala per le energie (usa $\hbar c = 197.327$ MeVfm). Le variabili adimensionali diventano: $x = r/R$, $v = V_0/\lambda$, $e = -E/\lambda$. Con questa scelta tutte le variabili diventano positive. Verifica che la condizione in Eq. (6) diventa

$$\cot(\sqrt{v-e}) = -\sqrt{\frac{e}{v-e}} \tag{7}$$

2. considera $R = 1.93$ fm e $V_0 = 38.5$ MeV e fai un grafico delle funzioni nei due lati di Eq. (6) in funzione di e (in gnuplot usa $cot(x) = 1/tan(x)$). Verifica se esistono soluzioni corrispondenti a stati legati. Usa i metodi della bisezione e secante per determinare l'autovalore E corrispondente allo stato legato. Fai una tabella e/o un grafico che mostri la convergenza in funzione del numero di iterazioni.

3. [BONUS] prova a usare anche l'algoritmo di Newton-Raphson

4. [BONUS] prova a visualizzare come prima la soluzione quando $V_0 = 27.4$ MeV, cosa succede in questo caso? Che condizione deve soddisfare kR perché esista almeno uno stato legato? E per averne esattamente uno?

5. calcola il valore di aspettazione del raggio quadratico medio $< r^2 >$ sullo stato $\Psi(\vec{r})$ usando il metodo di Simpson.

- suggerimento: usa la continuitá di $u(r)$ in $r = R$ per esprimere B in funzione di A e normalizza esplicitamente il valore d'aspettazione

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int d^3\vec{r}\Psi(\vec{r})r^2\Psi(\vec{r})}{\int d^3\vec{r}\Psi^2(\vec{r})} \tag{8}$$