

# 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

$$\begin{array}{ll} \text{(a)} \int_0^A dx \sin^2(\alpha x) & \text{(c)} \int_B^\infty dx e^{-\beta x} \\ \text{(b)} \int_0^A dx x^2 \sin^2(\alpha x) & \text{(d)} \int_B^\infty dx x^2 e^{-\beta x} \end{array}$$

- 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  $\infty$  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 proprietà.

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

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

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

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

Consideriamo un modello semplice del potenziale nucleare dato da

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

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 può essere scritta quindi come

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

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  $V_0 + E > 0$ )

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

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

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

1. riscrivi la soluzione in Eq. (5) e la condizione in Eq. (6) usando variabili adimensionali usando  $R$  come scala per le distanze e  $\lambda = \hbar^2/(2\mu R^2)$  come scala per le energie (usa  $\hbar c = 197.327 \text{ MeVfm}$ ). Le variabili adimensionali diventano:  $x = r/R$ ,  $v = V_0/\lambda$ ,  $e = -E/\lambda$ . Con questa scelta tutte le variabili diventano positive.
2. considera  $R = 1.93 \text{ fm}$  e  $V_0 = 38.5 \text{ MeV}$  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  $V_0 = 27.4 \text{ MeV}$ , 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  $\langle r^2 \rangle$  sullo stato  $\Psi(\vec{r})$  usando il metodo di Simpson.

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

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int d^3\vec{r} \Psi(\vec{r}) r^2 \Psi(\vec{r})}{\int d^3\vec{r} \Psi^2(\vec{r})} \quad (7)$$