
INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE REACCIONES NUCLEARES

EJERCICIOS DE CLASE - PROF. EDNA CAROLINA PINILLA.

A. F. Vargas-Londoño¹

¹*Departamento de Física, Universidad Nacional, Bogotá, Colombia*

Email: ¹anvargasl@unal.edu.co

18 de abril de 2024

Ejercicio 3

- a) Reproduzca la Fig. 3 del artículo D. Baye, Phys. Rep. 565 1 (2015) [1]
- b) Utilice el método variacional para hallar la energía del estado base del deuterio y dibuje la función radial $u_0(r)$ utilizando el potencial de la diapositiva 10 y las funciones anteriores. Introduzca un factor de escalamiento h (Ecuaciones (2.45) y (2.46) de [1]).

Es importante recordar entonces que se está resolviendo el problema de autovalores y autovectores de la matriz hamiltoniana dado por la ecuación:

$$Hu_l(r) = Eu_l(r) \quad (1)$$

Donde la función de onda radial $u_l(r)$ se puede hallar a partir del principio variacional expandiendo en una base de funciones ϕ

$$u_l(r) = \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(r) \quad (2)$$

Bajo esta expansión, el problema de autovalores toma entonces la siguiente forma al proyectar sobre una de las funciones de la base ϕ_i :

$$\sum_{j=1}^N c_j H_{ij} = \sum_{j=1}^N c_j [T_{ij} + V_{ij}^{eff}] = E_i c_i \quad (3)$$

donde T_{ij} y V_{ij}^{eff} son los elementos de la matriz $\langle \phi_i | T | \phi_j \rangle$ y $\langle \phi_i | V^{eff} | \phi_j \rangle$. Es claro entonces que los coeficientes de la expansión (2) están dados por las componentes de este problema de autovalores, es decir que $u_l(r) = \vec{c} \cdot \vec{\phi}$ con $\vec{c} = (c_1, c_2, \dots, c_N)$ un autovector de la matriz hamiltoniana y $\vec{\phi}$ la base de funciones ϕ en que se expande.

En este caso, la base está dada por las funciones de Lagrange-Laguerre regularizadas en la singularidad $x = 0$, las cuales están dadas por la ecuación (4)

$$\hat{f}_j(x) = \left(\frac{x}{x_j}\right)^n f_j(x) = (-1)^j x_j^{1/2} \left(\frac{x}{x_j}\right)^n \frac{L_N(x)}{x - x_j} e^{-x/2} \quad (4)$$

Donde una función de Lagrange $f_j(x)$ es aquella que cumple las condiciones de Lagrange:

1. Infinitamente diferenciables
2. $f_i(x_j) = \lambda_i^{-1/2} \delta_{ij}$

$$3. \langle f_i | f_j \rangle = \delta_{ij}$$

En particular, para un sistema de k cuerpos se toma $n = k - 1$, de modo que para el deuterio se tiene entonces $n = 1$.

a) La Fig. 3 de [1] puede entonces recrearse al tomar $h = 1$, $n = 1$ y $N = 4$ como se muestra en la Fig. 1.

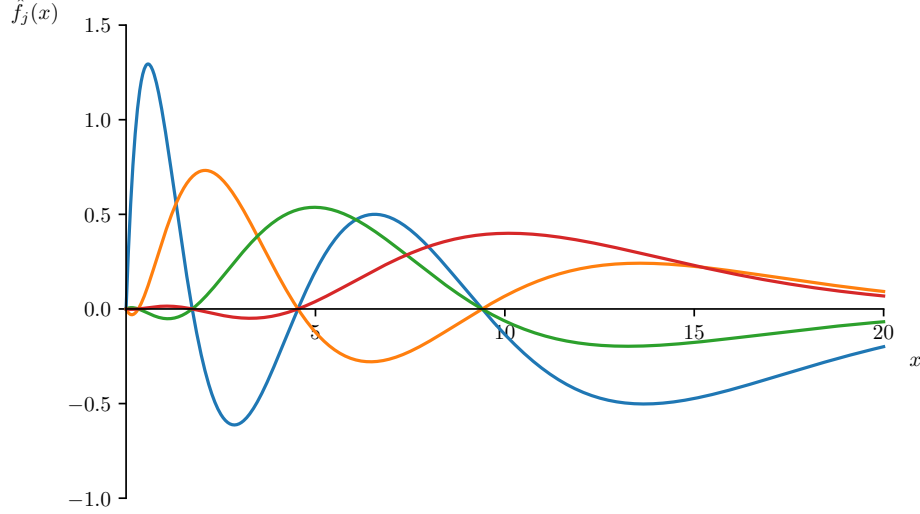


Figura 1: Funciones de Lagrange-Laguerre escaladas y regularizadas, $h = 1$, $n = 1$, $N = 4$.

Considerando el estado base del deuterio como una función exclusiva de $l = 0$, el potencial efectivo y energía cinética están dados por:

$$V^{eff}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) = V(r), \quad T = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} \quad (5)$$

Usando además una cuadratura de Gauss con puntos de malla en las raíces de los polinomios de Laguerre $L_N(x_i) = 0$, es posible entonces encontrar los elementos de matriz del potencial y la energía cinética, ecuaciones (2.28, 3.75, 3.76) de [1].

$$V_{ij}^{eff} = \langle \hat{f}_i | V^{eff} | \hat{f}_j \rangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu} V(r_i) \delta_{ij} = 200e^{-1.47r_i^2} - 178e^{-0.639r_i^2} \delta_{ij} \quad (6)$$

$$T_{ii} = -\frac{\hbar}{2\mu} \frac{x_i^2 - (4N+2)x_i - 4}{12x_i^2}, \quad T_{i \neq j} = \frac{\hbar}{2\mu} (-1)^{i-j} \frac{x_i + x_j}{(x_i \cdot x_j)^{1/2} (x_i - x_j)^2} \quad (7)$$

Teniendo una cuadratura de Gauss definida en s en el dominio (a, b) , es posible introducir otro parámetro variacional h que reescala el modelo, teniendo entonces el dominio (ha, hb) sobre la variable $x = hs$. Este factor de escala h tiene entonces los siguientes efectos en las funciones regularizadas de Lagrange-Laguerre (4) y el problema de autovalores (3):

$$\tilde{f}_j(x) = \frac{1}{h^{1/2}} \hat{f}_j(x/h) \quad (8)$$

$$\sum_{j=1}^N c_j \left[\frac{1}{h^2} T_{ij} + V_{ij}^{eff}(x_i h) \right] = E_i c_i \quad (9)$$

Es suficiente con esto entonces para hallar los elementos de la matriz hamiltoniana para resolver el problema de autovalores y autovectores.

- b) Dado que se quiere encontrar el valor de la energía E_0 del estado base del deuterio, es importante entonces determinar valores de los parámetros h y N que mejor aproximan dicha energía. La Figura 2 ilustra el cambio en el mínimo autovalor de H variando h entre $[0.1, 0.9]$ y N .

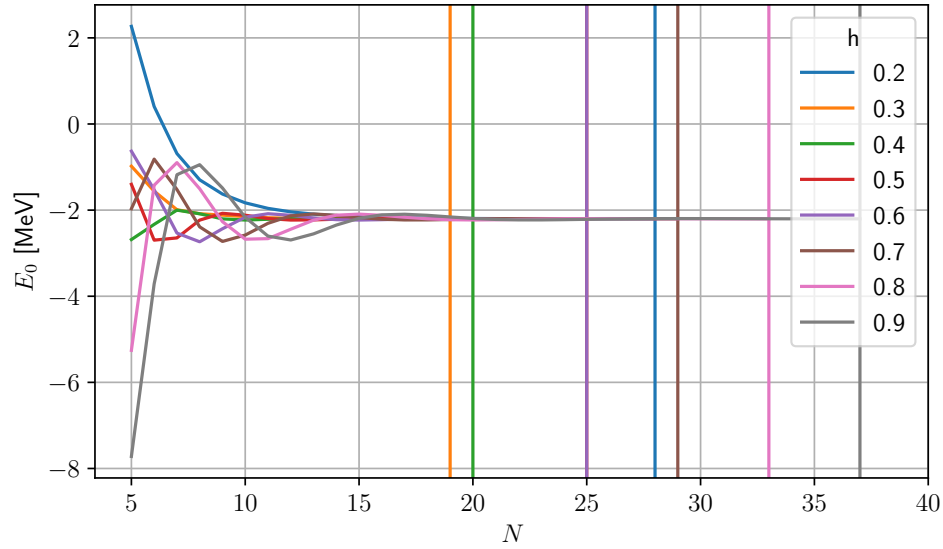


Figura 2: Energía del estado base del deuterio en función del número de funciones de Lagrange-Laguerre N y factor de escala h . Las líneas verticales representan el último valor de N usado para el h correspondiente.

En este caso para cada h se aumentó N hasta que la diferencia de E_0 para N y $N+1$ fuese menor a 10^{-4} , las líneas verticales indican el valor de N en que se alcanzó dicha diferencia, siendo $h = 0.3, 0.4, 0.5$ y 0.6 los más rápidos en converger.

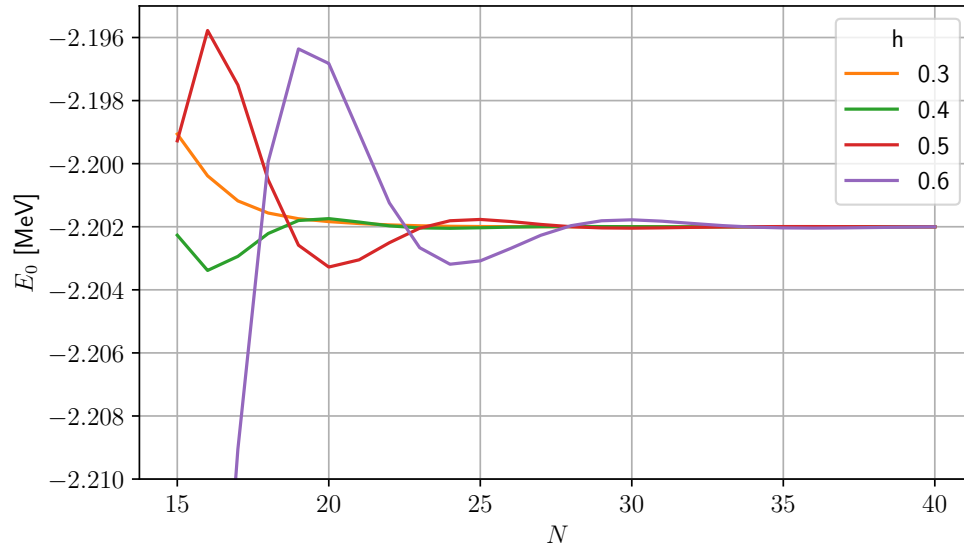


Figura 3: Energía del estado base del deuterio variando h entre $[0.3, 0.6]$ y N entre $[15, 40]$.

Es importante resaltar sin embargo que todos convergen a un valor similar de $E_0 \approx -2.202$ MeV como se ilustra en la Fig 3, el cual tiene un error del 1 % respecto al valor experimental de $E_0 = -2.225$ MeV.

Dado que $h = 0.3$ converge más rápido, es posible entonces tomar $N = 30$ para obtener una buena aproximación del sistema con una matriz pequeña. Bajo estas condiciones es posible ahora encontrar la función de onda tomando el autovector asociado a la energía E_0 .

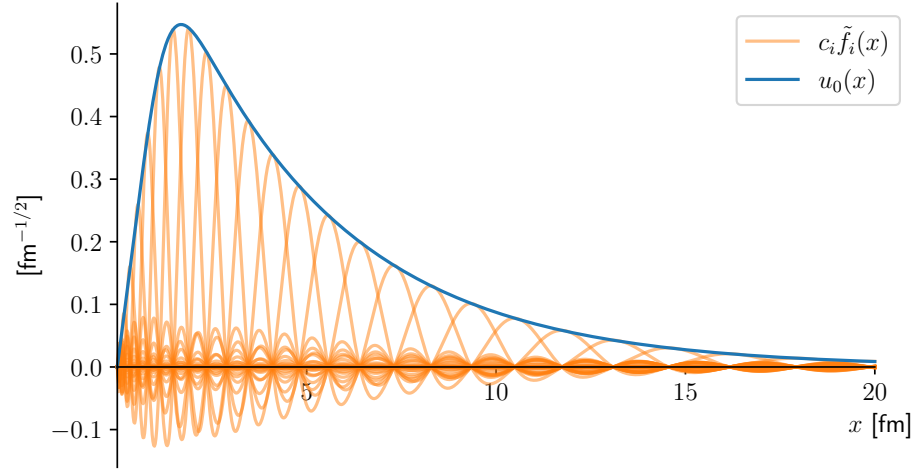


Figura 4: Función de onda radial $u_0(x)$ a partir de su expansión en funciones de Lagrange-Laguerre regularizadas y escaladas con $h = 0.3$ y $N = 30$.

Referencias

- [1] Daniel Baye. The lagrange-mesh method. *Physics reports*, 565:1–107, 2015.