

**Título em Português:** O método de Monte Carlo variacional aplicado a núcleos leves

**Título em Inglês:** The variational Monte Carlo method applied to light-nuclei

**Autor:** Rafael Carlos Silva Tonhon

**Instituição:** Universidade de São Paulo

**Unidade:** Instituto de Física de São Carlos

**Orientador:** Lucas Madeira

**Área de Pesquisa / SubÁrea:** Física Nuclear

**Agência Financiadora:** CNPq - PIBIC

## O método de Monte Carlo variacional aplicado a núcleos leves

Rafael Tonhon

Lucas Madeira

Universidade de São Paulo

tonhonr@usp.br

### Objetivos

Estudar sistemas nucleares de poucos corpos, com foco no único estado ligado de dois núcleons, o dêuteron. Inicialmente fazemos uso de um modelo simples, o poço esférico, para calcular propriedades do sistema, reproduzindo sua energia de ligação ( $E = -2,22$  MeV) e seu raio quadrático médio ( $r_{\text{rms}} = 2,1$  fm). Feito isso, utilizamos um modelo mais realístico para a interação. Por fim, obtemos a função de onda nesse modelo, construindo um estado teste adequado para a aplicação do método variacional de Monte Carlo.

### Métodos e Procedimentos

Nosso objetivo é estudar a interação nuclear, ou seja, temos que escolher um modelo de potencial para essa. Em um primeiro momento, queremos entender propriedades mais elementares do dêuteron (sua energia de ligação e raio quadrático médio). Para isso, vamos utilizar um potencial simples, o poço esférico:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R_0, \\ 0, & r \geq R_0. \end{cases} \quad (1)$$

Resolvemos a equação de Schrödinger

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (2)$$

(onde  $\mu$  representa a massa reduzida) numérica e analiticamente, ajustando os parâmetros  $V_0$  e  $R_0$  para que sejam reproduzidos os valores experimentais de interesse.

Nesse estágio, resolvemos a equação diferencial e obtemos duas famílias de pontos ( $V_0, R_0$ ) que reproduzem esses valores, uma associada aos que reproduzem a energia, e outra o  $r_{\text{rms}}$ . Encontrando o ponto em que as curvas se cruzam, estimamos o melhor par ( $V_0, R_0$ ). Fazemos isso através do método dos mínimos quadrados, na região de interesse. Obtemos esse resultado tanto com a solução analítica quanto com a numérica da equação (2).

Feito isso, mudamos o paradigma e propomos um potencial mais realístico. Com esse objetivo, incluímos no modelo os graus de liberdade de spin e isospin, afim de reproduzir a presença dos orbitais  $s$  e  $d$  na função de onda do dêuteron, bem como seu momento de quadrupolo. Para isso, adotamos o potencial [1]

$$V(r, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2) = v_i(r)\mathbf{I} + v_\sigma(r)\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + v_\tau(t)\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 + v_{\sigma\tau}(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2) + (v_s(r) + v_{s\tau}\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2)\mathcal{S}_{12}, \quad (3)$$

onde  $\mathcal{S}_{12} = 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \hat{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \hat{r}) - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$  é o operador tensor, responsável pela mistura dos orbitais  $s$  e  $d$ .

Sobre essa interação temos que considerar os graus de liberdade de spin e isospin do dêuteron, o que nos faz buscar por um estado da forma:

$$|\psi\rangle = f_0(r)|L=0, S=1; J=1, M_J\rangle + f_2(r)|L=2, S=1; J=1, M_J\rangle, \quad (4)$$

onde  $L$  e  $S$  representam, respectivamente, o momento angular orbital e o de spin (que sabemos, do experimento, ser  $S=1$ ) e  $J$  representa o momento angular total (o qual também sabemos, do experimento, ser  $J=1$ ), com sua projeção sendo  $M_J$ . Escolhendo o estado com projeção  $M_J = +1$  fomos capazes de obter equações diferenciais acopladas de ordem 2 que nos fornecem  $f_0(r)$  e  $f_2(r)$ . Essas equações foram resolvidas numericamente, quando dados os potenciais  $v_i(r)$  [2].

### Resultados

Abordamos a solução do poço esférico analiticamente para uma função  $u(r) = r\psi(r)$  bem comportada na origem. Também obtivemos essa solução numericamente, pelo método de Numerov. Comparamos os resultados na figura 1.

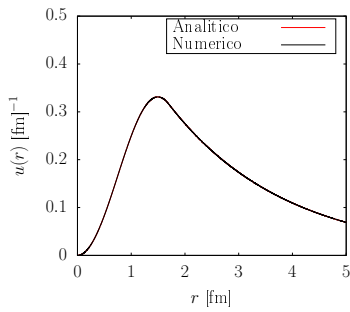


Figura 1: Comparação entre a solução analítica e numérica

Com esse modelo, fomos capazes de obter para as duas soluções as curvas correspondentes a energia e ao raio quadrático médio, com os valores estimados para o par  $(V_0, R_0)$  sendo

$$\begin{cases} V_0 = 8663,55 \text{ MeV}, R_0 = 0,11 \text{ fm (analítico)} \\ V_0 = 8280,07 \text{ MeV}, R_0 = 0,11 \text{ fm (numérico)} \end{cases} \quad (5)$$

Note que embora os valores numéricos da equação (5) difiram em magnitude, eles concordam em ordem de grandeza, com a profundidade do poço sendo 1000 vezes maior que a energia de ligação do sistema (em ordem de grandeza).

Tendo resolvido o modelo do poço esférico, passamos ao potencial da equação (3). Para resolver as equações que regem o modelo precisamos dos potenciais [2], os quais são mostrados individualmente na figura (2).

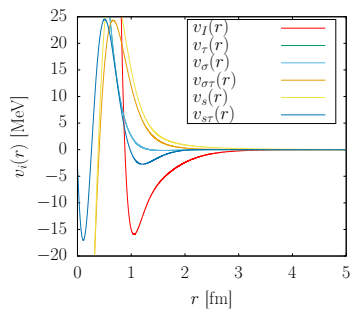


Figura 2: Potenciais  $v_i(r)$  do modelo da equação (3)

Com esses potenciais resolvemos as equações acopladas, obtendo como energia de ligação

$$E = -2,24 \text{ MeV}, \quad (6)$$

em boa concordância com o experimento, uma vez que construímos um modelo para o sistema, sem ajustar parâmetros para reproduzir suas grandezas, como na primeira etapa. As funções  $f_0(r)$  e  $f_2(r)$  estão expostas na figura 3.

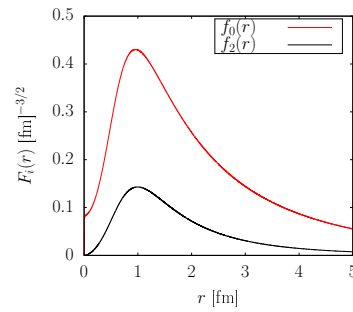


Figura 3: Funções  $f_2(r)$  e  $f_0(r)$ , soluções do segundo modelo utilizado

## Conclusões

Utilizamos dois modelos para a interação núcleon-núcleon. O modelo inicial, do poço esférico, embora simples, mostrou que pode ser válido, bastando encontrar os parâmetros adequados. Tais parâmetros mostram que o dêuteron é um estado fracamente ligado, o que explica a existência de um único estado ligado, bem como seu tamanho anormal quando comparado aos outros núcleos.

Por fim, utilizamos um modelo mais realista, que considerou os graus de liberdade de spin e isospin do sistema. Ao resolver a equação de Schrödinger nesse modelo obtivemos um estado capaz de reproduzir a energia de ligação do dêuteron. Com ele somos capazes de construir uma função de onda tentativa para a aplicação do método variacional de Monte Carlo, e aplicá-lo a sistemas de mais corpos, como o trítion e a partícula alfa.

## Referências Bibliográficas

[1] Madeira, Lucas. “Quantum Monte Carlo Studies of Strongly Interacting Fermionic Systems”. Tese de doutorado. Arizona State University, 2018.

[2] R. B. Wiringa e Steven C. Pieper. “Evolution of Nuclear Spectra with Nuclear Forces”. Em: Physical Review Letters 89.18 (out. de 2002). doi: 10.1103/physrevlett.89.182501. url: <https://doi.org/10.1103>

[3] Tommaso Comparin. “From few-body atomic physics to many-body statistical physics: the unitary Bose gas and the three-body hard-core model”. Tese de doutorado. Université Paris sciences et lettres, 2016.

## The variational Monte Carlo method applied to light nuclei

Rafael Tonhon  
Lucas Madeira  
University of São Paulo  
tonhonr@usp.br

### Objectives

Our objective is to study few-nucleon systems focusing on the only bound state of two nucleons, the deuteron. Initially, we use a simple model, the spherical well, to calculate the properties of the system, namely its energy ( $E = -2,22$  MeV) and mean square radius ( $r_{\text{rms}} = 2,1$  fm). We then examine a more realistic model that considers spin and isospin, obtaining the wave function for the system. Then, we are ready to implement the variational Monte Carlo method.

### Materials and Methods

To study the nuclear interaction, we need a potential model. As a first step, we want to reproduce some properties of the system (its energy and mean square radius), so we adopted a simple potential, the spherical well:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R_0, \\ 0, & r \geq R_0. \end{cases} \quad (1)$$

We then solve the Schrödinger's equation for this model

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (2)$$

(with  $\mu$  being the reduced mass) in two ways: analytically and numerically, and adjust the parameters  $V_0$  and  $R_0$  to reproduce the experimental values.

By solving the differential equation we can find two families of points  $(V_0, R_0)$ , one corresponding to the points that reproduce the energy and the other to the ones that reproduce the  $r_{\text{rms}}$ . The point where these families intersect gives us the best estimative for the pair  $(V_0, R_0)$ . We found this point by the least square method, applied to the region of interest. We do this to numerical and analytical solutions of the equation (2).

We then changed our approach, employing a potential that accounts for the spin and isospin degrees of freedom, so that it can reproduce the presence of the orbitals  $s$  and  $d$  in the deuteron

wave function, as well as its quadrupole moment. This potential function is given by [1]

$$V(r, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2) = v_i(r)\mathbf{I} + v_\sigma(r)\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + v_\tau(t)\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 + v_{\sigma\tau}(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2) + (v_s(r) + v_{s\tau}\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2)\mathcal{S}_{12}, \quad (3)$$

where  $\mathcal{S}_{12} = 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \hat{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \hat{r}) - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$  is the tensor operator responsible for the mixture of the orbitals  $s$  and  $d$ .

When considering this interaction, we needed to explicitly evaluate the spin and isospin, so we look for a state of the form:

$$|\psi\rangle = f_0(r)|L=0, S=1; J=1, M_J\rangle + f_2(r)|L=2, S=1; J=1, M_J\rangle, \quad (4)$$

where  $L$  and  $S$  represent, respectively, the orbital angular momentum and the spin angular momentum (known to be 1 for the deuteron), and  $J$  represents the total angular momentum (that we also know to value 1), with its  $z$  projection,  $M_J$ . By choosing the projection  $M_J = +1$  we were able to find a system of two second-order coupled differential equations that provide us with the radial functions  $f_0(r)$  and  $f_2(r)$ . We then solve these equations numerically, with realistic potentials functions  $v_i(r)$ .

### Results

We began with the spherical well and solved equation (2) to get the function  $u(r) = r\psi(r)$ , which is analytical at the origin. We also obtained this solution numerically by applying Numerov's method. Both solutions are compared in figure 1.

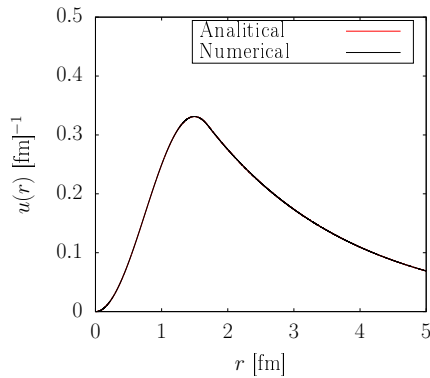


Figure 1: Comparison between the analytical solution and the obtained with Numerov's method.

With this model, we found the curves that reproduce the energy and the mean square radius for each solution, and the matching point. The results are

$$\begin{cases} V_0 = 8663,55 \text{ MeV}, R_0 = 0,11 \text{ fm (analytical)} \\ V_0 = 8280,07 \text{ MeV}, R_0 = 0,11 \text{ fm (numerical)} \end{cases} \quad (5)$$

We can see that the absolute value of the two solutions is not the same, but they are of the same order. More than that, we showed that the depth of the well is 1000 times greater than the energy of the system, which demonstrates that this system is **weakly-bound**.

After solving the spherical well potential, we moved on to the model of equation (3). The differential equations can only be solved once the potentials  $v_i(r)$  are known. The realistic potential we used is shown in figure 2 [2].

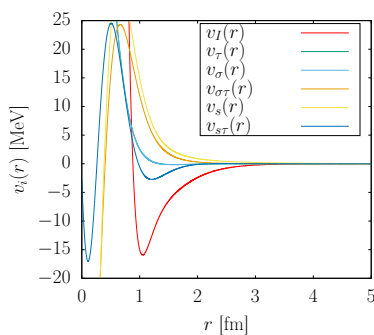


Figure 2: Potentials  $v_i(r)$ , see equation 3

With the potentials in hand, we solved the coupled equations and found an energy of

$$E = -2,24 \text{ MeV}, \quad (6)$$

close to the experimental value. We took a different approach in this second step, proposing a potential for the interaction and looking for a

wave function. In this way, this result is in good accordance with the experiment. Functions  $f_0(r)$  and  $f_2(r)$  are presented in figure 3.

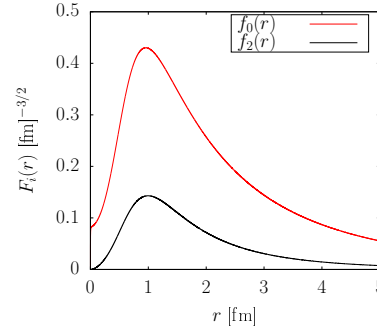


Figure 3: Functions  $f_2(r)$  and  $f_0(r)$ , solutions of the second model

## Conclusions

We investigated two models for the nuclear interaction. The spherical well, although simple, was able to describe important features of the system. From this model, the weak binding of the deuteron was demonstrated, which explains its large radius compared to other nuclei, and also why there is only one bound state: the system is at the threshold of being a scattering state.

Finally, we used a more realistic model that accounted for the spin and isospin degrees of freedom. When we solved Schrodinger's equation for this model, we found a state that can reproduce the binding energy of the deuteron. Now we can construct a trial wave function and apply the variational Monte Carlo method, extending the method for systems with more than two particles, such as the triton and the alpha particle.

## References

- [1] Madeira, Lucas. "Quantum Monte Carlo Studies of Strongly Interacting Fermionic Systems". Ph. D thesis. Arizona State University, 2018.
- [2] R. B. Wiringa e Steven C. Pieper. "Evolution of Nuclear Spectra with Nuclear Forces". In: Physical Review Letters 89.18 (Oct. 2002). doi: 10.1103/physrevlett.89.182501. url: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.89.182501>
- [3] Tommaso Comparin. "From few-body atomic physics to many-body statistical physics: the unitary Bose gas and the three-body hard-core model". Ph. D thesis. Université Paris sciences et lettres, 2016.