

Metódo Monte Carlo Variacional(MMCV) aplicado ao cálculo do estado fundamental do átomo de Hélio

Luis Vinicius Costa Silva¹

UFCAT, Catalão, GO

Marcos Aurélio Batista²

UFCAT, Catalão, GO

O átomo de hélio é composto por dois elétrons orbitando um núcleo nas posições r_1 e r_2 , no núcleo têm-se dois prótons com uma carga e_i e dois neutrôns com carga neutra. O núcleo é considerado em repouso centrado na origem do plano cartesiano. Utilizando as unidades atômicas: $\hbar = m_e = e = 1$, o hamiltoniano da dinâmica dos elétrons é dado por:

$$H = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (1)$$

Experimentos práticos mostram que o *ground state* do átomo de hélio é aproximadamente -2.90472 ua [3]. Busca-se obter uma solução para o problema do estado fundamental do hélio utilizando um método variacional de Monte Carlo, visto que este problema não tem solução analítica (devido ao termo de repulsão eletrônica do hamiltoniano).

Como função de teste no MMCV, foi utilizada uma função de Slater-Jastrow [1] da forma abaixo:

$$\Psi(r_1, r_2) = \begin{cases} e^{-2r_1} e^{-2r_2} & \iff r_{12} = 0 \\ e^{-2r_1} e^{-2r_2} e^{-\alpha} & \iff r_{ij} \gg 1 \end{cases} \quad (2)$$

Minimizando a função para $\alpha \ll 1$, a energia de interação repulsiva entre os dois elétrons tende a ser minimizada, tornando o problema mais bem comportado.

A seguinte função foi obtida para calcular a energia local no MMCV: [2]

$$E_L(r_1, r_2) = -Z^2 + \frac{Z-2}{r_1} + \frac{Z-2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \left[1 - \frac{2\beta}{(1+\alpha r_{12})^2} \right] + \frac{2\alpha\beta}{(1+\alpha r_{12})^3} - \frac{\beta^2}{(1+\alpha r_{12})^4} + \frac{Z\beta}{(1+\alpha r_{12})^2} \hat{r}_{12}(\hat{r}_1 - \hat{r}_2) \quad (3)$$

A equação 3 apresenta singularidade, este fato é facilmente contornado através da adição da condição de igualdade da forma: $Z = 2$ e $\beta = \frac{1}{2}$. Assim todos os termos que causam singularidade na função se cancelam e a função pode ser utilizado na implementação do Método Variacional de Monte Carlo.

Uma vez que o MMVC foi implementado em linguagem Python, foram gerados gráficos para uma análise de sensibilidade dos parâmetros em função da média e variância da energia calculada. Os gráficos da figura 1 apresentam o comportamento da energia média em função da variação dos parâmetros da função de teste (i.e: parâmetros α , β e Z). No primeiro gráfico, foi definido $\alpha = 0.1$ e $\beta = 0.5$, no segundo gráfico tem-se $Z = 2$ e $\alpha = 0.1$, finalmente no terceiro gráfico têm-se $Z = 2$ e $\beta = 0.5$:

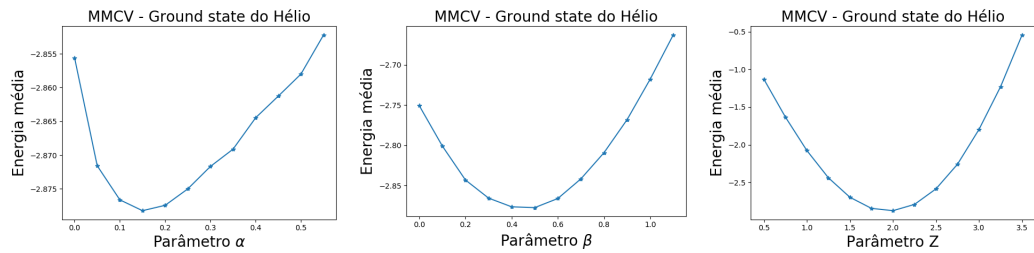


Figura 1: Energia média em função dos parâmetros da função de teste

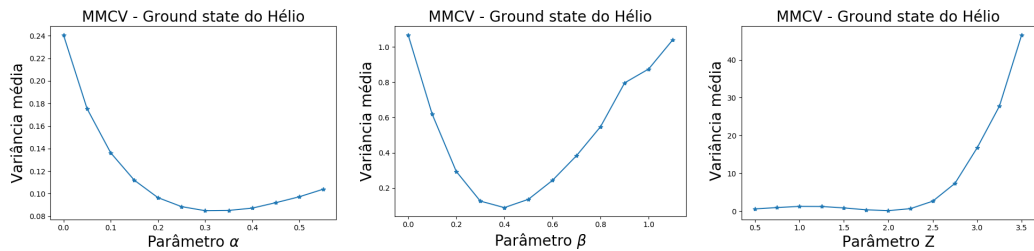


Figura 2: Variância média em função dos parâmetros da função de teste com condição de singularidade imposta

O método desenvolvido foi capaz de computar o estado fundamental, obtendo um resultado aproximado de 2.89922 ua , com um erro absoluto na ordem de 10^{-3} quando comparado ao resultado experimental. A energia média possui uma grande sensibilidade ao parâmetro Z , uma moderada sensibilidade a escolha do parâmetro β e quase independe da variação do parâmetro α , assim reforçando a necessidade das condições de singularidade. Adicionalmente pode-se concluir que a interação elétron-elétron não contribui para grandes variações nas soluções obtidas (diferentemente das interações núcleo-elétron), algo já esperado dada a massa do núcleo ser infinitamente maior que a do elétron. Espera-se que o MMCVC desenvolvido seja aperfeiçoado, de tal forma que a função de teste seja fornecida por uma rede neural artificial, e assim facilite o estudo de *ground-states* de outros átomos e materiais em cenários mais complexos (e.g: na presença de campo magnético).

Referências

- [1] Jastrow, Robert. *Many-body problem with strong forces*. *Physical Review*, v. 98, n. 5, p. 1479, 1955.
- [2] Kato, T. *On the eigenfunctions of Many-Particle Systems in Quantum Mechanics II Commun. Pure Appl. Math*, v. 10, p. 151-177, 1957.
- [3] Thakkar, Ajit J.; KOGA, Toshikatsu. *Ground-state energies for the helium isoelectronic series*. *Physical Review A*, v. 50, n. 1, p. 854, 1994.

¹luisvinicius@discente.ufg.br

²marcos.batista@ufg.br