Part 2

Estudi de l'^{3}He en tres dimensions

3. Introducció. Pla de l'estudi

Una manera simple però eficient d'escriure la funció d'ona variacional de l'heli és usant la forma de Jastrow-Feenberg. En ella la funció d'ona es desdobla en el producte d'una funció de correlació $F(\vec{R})$ que inclou les correlacions dinàmiques induïdes pel potencial, i una funció $\Phi(1,\ldots,N)$ que descriu el sistema en absència d'interaccions:

$$\Psi(1,\ldots,N) = F(\vec{R})\Phi(1,\ldots,N) \tag{3.1}$$

La funció $F(\vec{R})$ es pot expandir, seguint la forma proposada per Jastrow, en una sèrie de termes que inclouen les correlacions a *2,3,…,n* cossos:

$$F_J(\vec{R}) = exp\left\{\sum_{i<j} u_2(\vec{r}_i,\vec{r}_j) + \sum_{i<j<k} u_3\left(\vec{r}_i,\vec{r}_j,\vec{r}_k\right) + \ldots\right\} \tag{3.2}$$

En aquest treball s'intenta obtenir la millor funció d'ona variacional, i s'analitzen per separat les diferents correlacions a incloure, estudiant en cada cas el conjunt òptim de paràmetres a emprar. Cadascun dels termes inclosos a la funció d'ona aporta nous termes a l'expressió de l'energia cinètica, els quals són obtinguts analíticament als apèndixs corresponents.

Al capítol 5 es cerca la millor funció de correlació a dos cossos. La descripció més elemental que pot fer-se per a l'^{3}He consisteix en imaginar el sistema sense correlacions, de manera que la funció d'ona es convertiria en el determinant d'Slater d'ones planes, però aquesta descripció no s'estudia en el treball, ja que l'^{3}He és un sistema d'àtoms fortament correlacionats. Primerament s'inclou la interacció a dos cossos $u_2(r_{ij})$ fent servir una funció McMillan: $(b/r)^5$, i s'analitza també l'efecte de millorar la funció $f(r)$ amb termes nous. Es pren el factor $\Phi(1,\ldots,N)$ com el determinant d'Slater.

El següent capítol (capítol 6) està dedicat a la inclusió dels termes d'interacció a tres cossos $u_3(r_{ij},r_{ik},r_{jk})$ dins del desenvolupament de $F(\vec{R})$.

Segueix el capítol dedicat a l'altre mecanisme de correlació inclòs: el backflow, del qual es justifica la seva inclusió. El backflow s'incorpora en el determinant de Slater de la funció d'ona substituint les coordenades reals $\{\vec{r}_j\}$ de les partícules per unes coordenades desplaçades $\{\vec{r}_j'\}$ en la següent forma:

$$\exp\{i\vec{k}_i\vec{r}'_j\} \rightarrow \exp\left\{i\vec{k}_i\left(\vec{r}_j + \sum_{k\neq j}\eta(r_{kj})\vec{r}_{kj}\right)\right\} \tag{3.3}$$

A continuació es desenvolupen nous termes de correlació en un intent de millorar la descripció variacional. El backflow és el primer terme d'un desenvolupament que pot obtenir-se de forma iterativa. En el capítol 8 es calculen els termes corresponents a la següent iteració. De tots els nous termes obtinguts se n'estudien els més importants, veient quin és el seu efecte en el càlcul de l'energia per partícula.

Finalment, en el darrer capítol d'aquesta part s'estudia una nova via per a intentar millorar la funció d'ona. Consisteix en modificar la part Jastrow de la funció d'ona en una forma paral·lela a la que s'ha seguit per a introduir el backflow.

En cadascun dels mecanismes de correlació introduïts s'ha fet un estudi previ per a optimitzar els paràmetres a emprar. El mètode d'optimització dels paràmetres no ha estat sempre el mateix, però en tot cas ha mostrat ser un tema força complex i delicat. L'ús de rutines com *simplex* per a optimitzar simultàniament més d'un paràmetre no ha resultat gaire eficaç, i sovint ha estat més convenient triar els paràmetres més rellevants en el càlcul de l'energia per a optimitzar-los després individualment.

Si no s'indica el contrari tots els càlculs d'heli normal tridimensional s'han fet amb *66* partícules i sempre a la densitat $\rho = 0.277\sigma^{-3}$, usant el potencial Aziz II. Els resultats inclouen les cues d'energia que s'expliquen a l'apartat 2.5.