

5. Funcions de correlació a dos cossos

En l'intent d'obtenir la millor funció d'ona variacional per a l' ^3He s'ha començat per estudiar els termes a dos cossos. Es fa servir la funció de correlació de Jastrow [Ja55]:

$$F_J(\vec{R}) = \prod_{i < j=1}^N f(r_{ij}) = \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_{i < j=1}^N u_2(r_{ij})\right\} \quad (5.1)$$

La funció $u_2(r)$ que apareix a l'exponencial s'anomena pseudopotencial, i $f(r)$ és el factor de correlació a dues partícules, que compleix les següents condicions límit:

- a) s'anul·la en la regió on el potencial és fortament repulsiu

$$f(r) = 0 \quad \text{si} \quad r \leq R_c \quad (5.2)$$

- b) tendeix a la unitat a grans distàncies

$$\lim_{r \rightarrow \infty} f(r) = 1 \quad (5.3)$$

Una tria senzilla per a la funció $f(r)$ és la que fou suggerida per McMillan [Mc65] i Schiff i Verlet [SV67]:

$$f(r) = \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{b}{r}\right)^5\right\} \quad (5.4)$$

on b és una constant a determinar.

Tot i existir referències sobre el valor òptim per a la constant b , se l'ha preferit optimitzar, i comprovar que certament aquell era el millor valor. El resultat obtingut coincideix amb el referit a l'article de Schmidt et al. [SLKC81] (taula 5.1), obtenint $b = 1.15\sigma$ com a valor òptim.

b	$E(K)$
1.13	-1.13±0.02
1.14	-1.20±0.02
1.15	-1.23±0.02
1.16	-1.22±0.02
1.17	-1.18±0.02

Taula 5.1

Optimització de la constant b de McMillan

Una modificació a la descripció Jastrow va ser proposada l'any 1979 per L.Reatto [Re79]:

$$F_R(\vec{R}) = \prod_{i < j=1}^N \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{b}{r_{ij}} \right)^5 - \frac{L_R}{2} \exp \left[-\left(\frac{r - \lambda_R}{\Lambda_R} \right)^2 \right] \right\} \quad (5.5)$$

La intenció d'aquesta modificació analítica de la funció McMillan és reproduir el més acuradament possible l'estructura que presenta la funció òptima Jastrow. La funció òptima és la que en resulta de l'optimització funcional $\frac{\delta \langle H \rangle}{\delta \mathcal{f}} = 0$ que porta a la resolució d'una equació d'Euler-Lagrange. Tant per l' ^4He com per l' ^3He la funció òptima pren valors per sobre la McMillan a distàncies inferiors als $\approx 2.0\sigma$, i en aquest punt es creuen. A distàncies superiors les corbes són quasi coincidents. Els tres paràmetres de la funció $(\lambda_R, \Lambda_R, L_R)$ fan que sigui molt modulable, i permeten ajustar molt bé la forma per a reproduir l'estructura esmentada. A la figura 5.1 es representa la funció amb els paràmetres òptims calculats en aquest treball:

$$\lambda_R = 1.3\sigma \quad \Lambda_R = 0.45\sigma \quad L_R = -0.10 \quad (5.6)$$

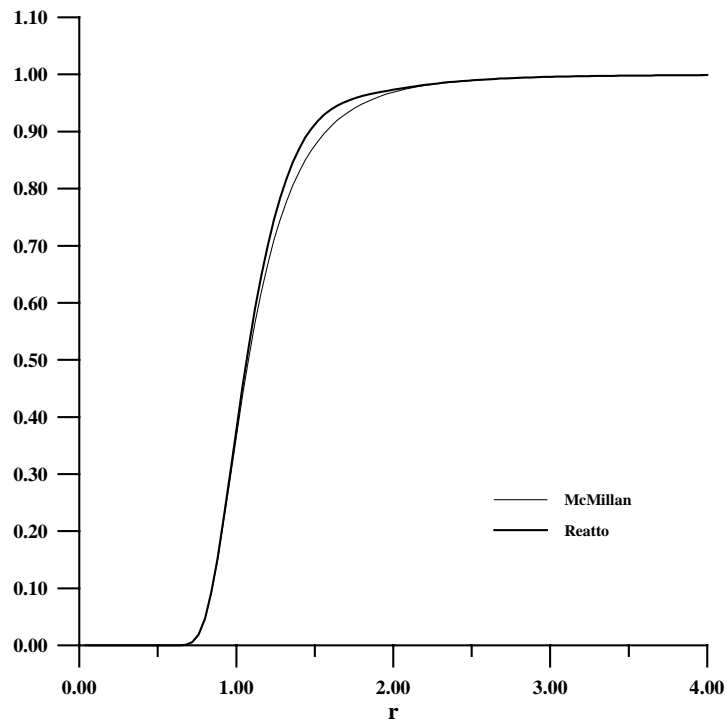


Figura 5.1

Comparació entre la funció McMillan de paràmetre $b = 1.15\sigma$ i la funció de Reatto de paràmetres: $\lambda = 1.3\sigma$, $\Lambda = 0.45\sigma$, $L = -0.10$ (distància en σ)

Les simulacions fetes amb correlacions a dos cossos han proporcionat les energies recollides a la taula 5.2. Si bé les simulacions s'han fet amb 66 partícules, l'avaluació dels diferents termes d'energia en la forma que s'ha explicat a l'apartat 2.5, legitima els resultats com a millors cotes a l'energia del sistema infinit.

	<i>McMillan</i>	<i>Reatto</i>
E_c (K)	13.27 ± 0.02	13.33 ± 0.05
V (K)	-14.36 ± 0.03	-14.55 ± 0.04
E (K)	-1.08 ± 0.02	-1.21 ± 0.04

Taula 5.2

Millors cotes a l'energia per al sistema amb correlacions a dos cossos

S'observa que l'ús de la funció de Reatto provoca un descens en l'energia de 0.13K respecte al resultat McMillan. La densitat del sistema és de $\rho = 0.277\sigma^{-3}$.

A continuació s'ha calculat el mateix sistema encara amb 66 partícules però canviant el potencial HFD-B(HE) pel més antic HFDHE2, per tal de poder comparar amb altres resultats prèviament existents:

	E (K)
<i>McMillan</i>	-0.96±0.02 (-1.06)
<i>Reatto</i>	-1.09±0.04 (-1.19)
[SLKC81] <i>McMillan</i>	-1.08±0.03
[MFS95] <i>Òptima a dos cossos</i>	-1.233±0.030
[Ar92] <i>McMillan</i>	-1.10
[Ar92] <i>Parametrització d'Euler</i>	-1.23

Taula 5.3

Comparació entre diferents resultats variacionals incloent només correlacions a dos cossos i el potencial HFDHE2. Entre parèntesi s'indica el resultat sense la correcció de l'energia de Fermi.

Les dades [SLKC81] del treball de Schmidt, Lee, Kalos i Chester són resultats VMC amb 54 partícules. La segona comparació és amb l'article de Moroni, Fantoni i Senatore [MFS95], són càlculs VMC en que usen funcions òptimes amb 54 partícules. Finalment les dades [Ar92] corresponen al treball d'Arias de Saavedra, que s'han obtingut amb el formalisme FHNC.

La comparació no és fàcil degut a les diferències en els càlculs. Entre parèntesi s'ha indicat el valor que s'obté sense fer la correcció a l'energia de Fermi. S'observa llavors una major coincidència entre els resultats amb McMillan. Així mateix s'observa un fort apropament entre el resultat amb la funció de Reatto i els obtinguts amb l'ús de funcions

òptimes. En cap de les referències Monte Carlo es fa esment a cap correcció sobre l'energia de Fermi, i sembla molt probable que no s'hagi fet.

Finalment s'ha calculat el sistema descrit a [SLKC81], amb 54 partícules, els mateixos paràmetres i sense la correcció d'energia de Fermi. Els resultats coincideixen dins dels marges d'error (taula 5.4). Aquests resultats indiquen que, almenys en aquest sistema, el càlcul de les cues i la petita diferència en les densitats (els dos únics elements diferents) no ocasionen diferències rellevants.

	E (K)
SLKC81	-1.08 ± 0.03
Aquest treball	-1.05 ± 0.02

Taula 5.4

Càlcul del sistema descrit a SLKC81:

HFDHE2, 54 partícules i amb els
valors dels paràmetres allà descrits