

12. L'heli normal.

En aquest capítol es fa l'anàlisi DMC del sistema introduint l'estadística fermiònica. Primer de manera aproximada, incloent només el terme més important de l'estadística, que és l'energia de Fermi del sistema lliure. Després implementant dins el programa DMC el determinant d'Slater en forma exacta.

12.1. Primera aproximació al sistema fermiònic.

Una manera aproximada d'introduir l'estadística fermiònica en l'anterior descripció bosònica consisteix en afegir l'energia de Fermi E_F del sistema lliure als resultats del càlcul bosònic $E_{bosònic}$:

$$E_{fermiònic} \approx E_F + E_{bosònic} \quad (12.1)$$

essent:

$$\frac{E_F}{N} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \pi \rho \quad (12.2)$$

amb

$$k_F = \sqrt{2\pi\rho} \quad (12.3)$$

Aquesta correcció és forçosament massa simple, però dóna una idea de l'efecte de les correccions.

D'aquesta forma s'incorpora l'estadística de Fermi afegint el valor de l'energia de Fermi a cadascun dels valors bosònics. Els resultats s'han representat a la figura 12.1, en que es comparen amb els del sistema bosònic. La diferència és important, ja que canvia totalment la forma de la corba, i desapareix l'estat lligat. Es veurà més endavant que una estructura semblant es manté en calcular exactament l'antisimetria, però que la coincidència entre els resultats només és bona a baixes densitats ($\rho \leq 0.10\sigma^{-2}$).

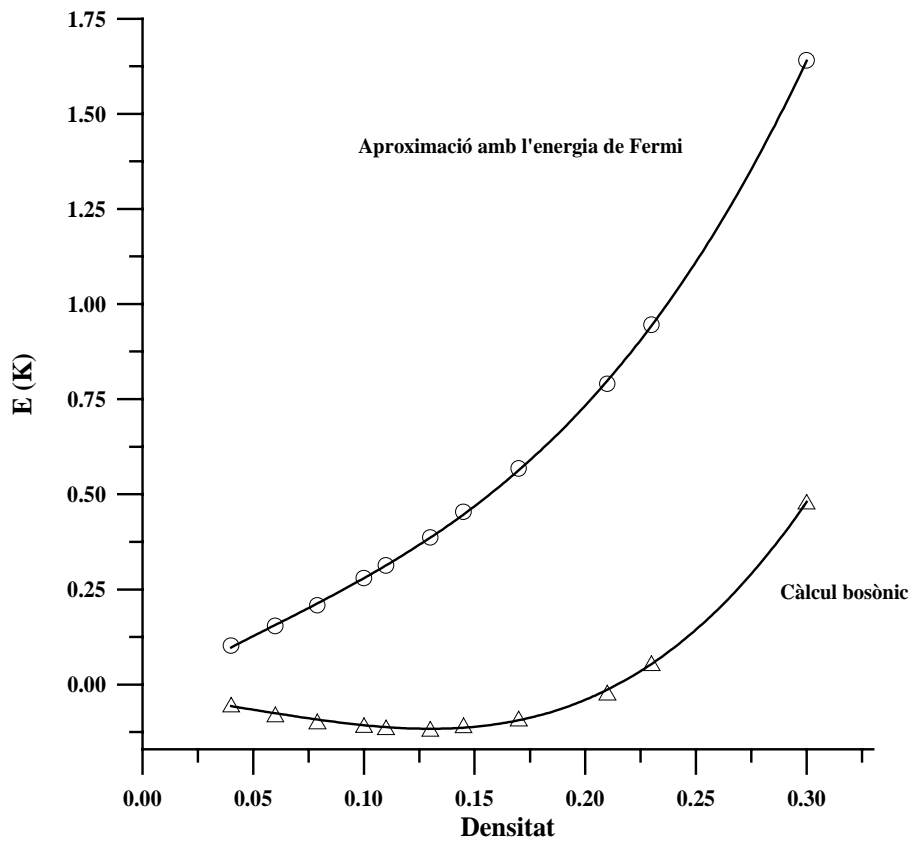


Figura 12.1

Aproximació al sistema fermiònic per inclusió de l'energia de Fermi del sistema lliure. Es compara el resultat amb la descripció bosònica de l' ^3He

12.2. Inclusió de l'antisimetria en la descripció de l' ^3He .

El càlcul aproximat del sistema fermiònic mostra ja un sistema bidimensional no lligat, però per a obtenir-ne una resposta fiable és necessari introduir de forma exacta l'antisimetria. Els càlculs són més llargs, però les considerables diferències respecte als resultats obtinguts amb el sistema aproximat en justifiquen el seu ús.

Els resultats del càlcul numèric, si no s'explicita el contrari, inclouen les cues d'energia explicades al capítol 2. Pot trobar-se una estimació del seu valor als apèndixs A i B.

Optimització dels paràmetres.

Hi ha tres paràmetres que ha calgut analitzar abans d'encetar els càlculs DMC:

- a) el nombre de partícules de la caixa
- b) el valor del paràmetre b de la funció de correlació a dos cossos
- c) i el valor del pas de temps a emprar en el programa

a) El primer que cal decidir és el nombre de partícules a emprar. El valor triat és un compromís entre mantenir un número prou gran de partícules i evitar càlculs massa llargs. Mantenir capes plenes limita aquesta tria als valors tabulats a la quarta columna de la taula 2.2 (capítol 2). Amb els mitjans de càlcul disponibles una tria adequada és: $N_{\uparrow}=N_{\downarrow}=29$. Prendre el següent valor de la taula 2.2 implica un augment considerable en el temps de càlcul que tampoc no es veu compensat per cap millora en els resultats.

b) La constant b de la funció d'ona és el principal paràmetre a optimitzar.

Una primera estimació del valor d'aquesta constant pot obtenir-se per comparació amb el sistema tridimensional, i s'ha usat com a indicació per a la cerca del valor òptim.

Així, a 3D, es coneix que en ^3He bosònic té un valor de $b = 1.17\sigma$ i per a ^3He fermiònic un valor de $b = 1.15\sigma$. Suposant que per a 2D es manté aquesta diferència, i com

que el valor òptim assignat al sistema bosònic és $b = 1.19\sigma$, el resultat així predit seria de $b = 1.17\sigma$.

Aquesta previsió resulta ser força coincident amb els resultats obtinguts de l'optimització, que ha estat feta a una densitat de $\rho = 0.1\sigma^{-2}$. La figura 12.2 il·lustra l'optimització d'aquesta constant. Sobre les dades s'hi ha ajustat un polinomi de segon grau, que situa el mínim sobre $b = 1.16\sigma$.

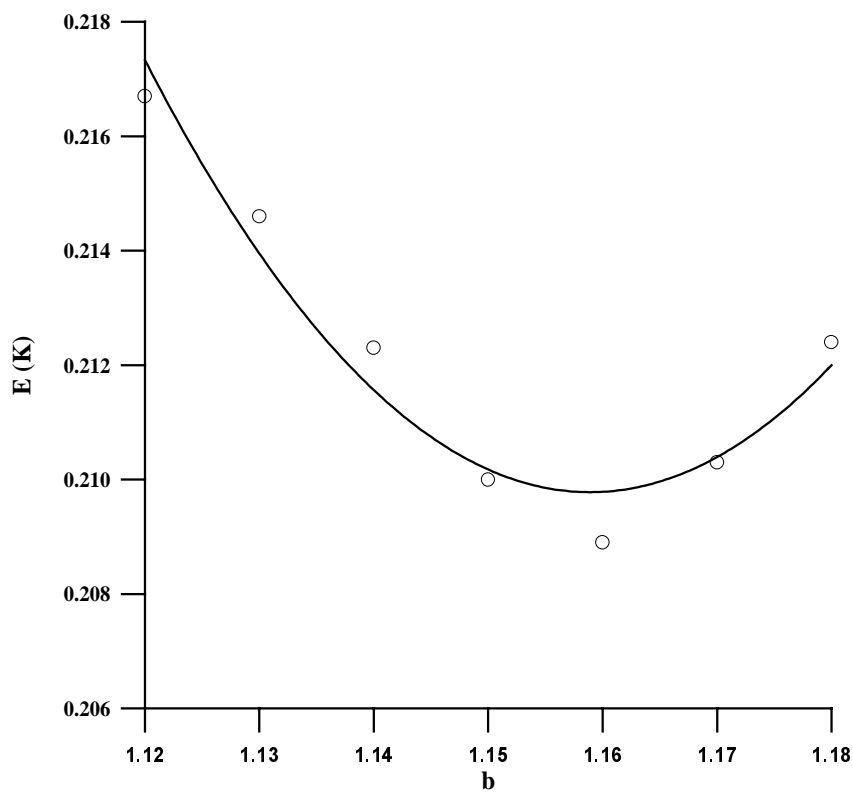


Figura 12.2.

Ajust quadràtic entre $b = 1.12\sigma$ i $b = 1.18\sigma$ sobre els resultats obtinguts en l'optimització de b .

c) Finalment s'ha fet una anàlisi del pas de temps, ja que en DMC els resultats poden mostrar una petita dependència en el seu valor. L'anàlisi s'ha fet a la densitat $\rho = 0.1\sigma^{-2}$. A la figura 12.3 pot veure's una representació dels resultats obtinguts. En créixer el pas de temps l'energia es separa del valor assintòtic quan $\Delta t \rightarrow 0$, i la variància en canvi, disminueix una mica. Això és el que s'observa en el gràfic fins a valors de l'ordre de $0.673 \cdot 10^{-3} \text{K}^{-1}$. Quan el pas de temps ja és molt gran tant la variància com l'energia augmenten molt. Per altra banda un valor massa baix d'aquest pas tampoc no dóna una mesura correcta de l'energia, ja que no explora adequadament totes les possibles configuracions. Un valor de l'ordre de $0.269 \cdot 10^{-3} \text{K}^{-1}$ és el que s'ha considerat adequat.

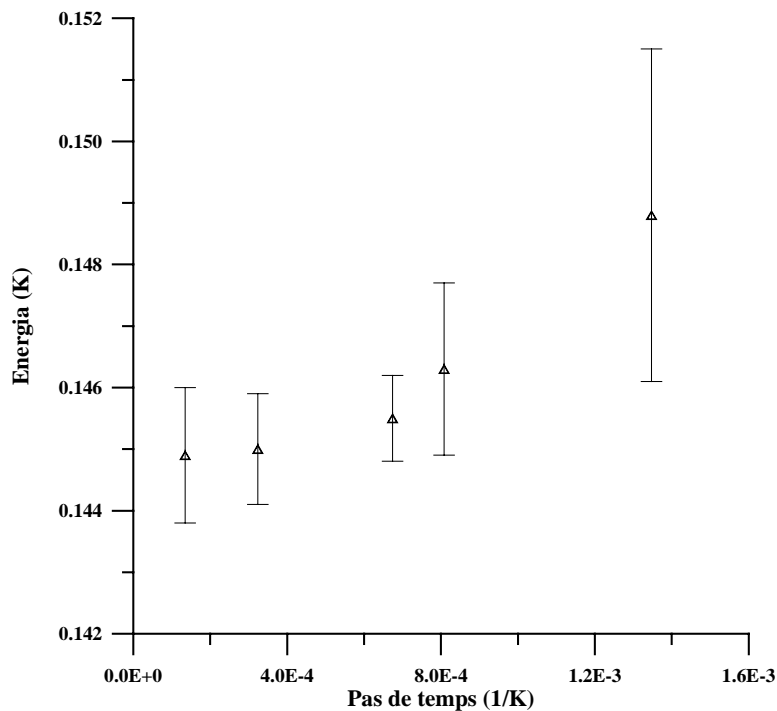


Figura 12.3

Energies obtingudes en el sistema bidimensional normal sense backflow en variar el pas de temps

Estudi en densitats. Resultats.

A la taula 12.1 s'hi resumeixen els resultats obtinguts per a l'energia a diferents densitats.

Densitat (σ^2)	E (K)		
		0.10	0.1324±0.0008
0.01	0.0292±0.0002	0.12	0.1515±0.0012
0.02	0.0495±0.0004	0.17	0.2258±0.0023
0.04	0.0788±0.0006	0.21	0.3523±0.0035
0.06	0.0999±0.0005	0.23	0.4308±0.0044
0.08	0.1208±0.0008	0.30	0.9041±0.0198

Taula 12.1

Resultats DMC per al sistema fermiònic sense backflow.

A efectes de comparació, a la figura 12.4 s'hi representen aquests valors juntament amb els resultats obtinguts en les descripcions fermiònica aproximada i bosònica.

El primer que destaca en comparar les tres descripcions del sistema bidimensional és el fet que en introduir el caràcter fermiònic en qualsevol de les dues formes, el sistema deixa de lligar en tot el rang de densitats estudiat.

Si es comparen la descripció aproximada amb l'exacta s'observa que el descens en l'energia ocasionat pel fet d'incloure el determinant d'Slater és més important conforme creix la densitat, i només a molt baixes densitats les dues descripcions s'assemblen.

En segon lloc remarcar la forma característica de la corba, amb un canvi de concavitat situat pels volts de $0.10\sigma^{-2}$. Aquesta estructura no canvia amb la inclusió del backflow, com es veurà en el següent capítol. Els punts poden ajustar-se molt bé amb el polinomi de tercer grau:

$$\frac{E}{N} = 0.0117889 + 2.14397\rho - 15.1876\rho^2 + 59.882\rho^3 \quad (\text{K}) \quad (12.4)$$

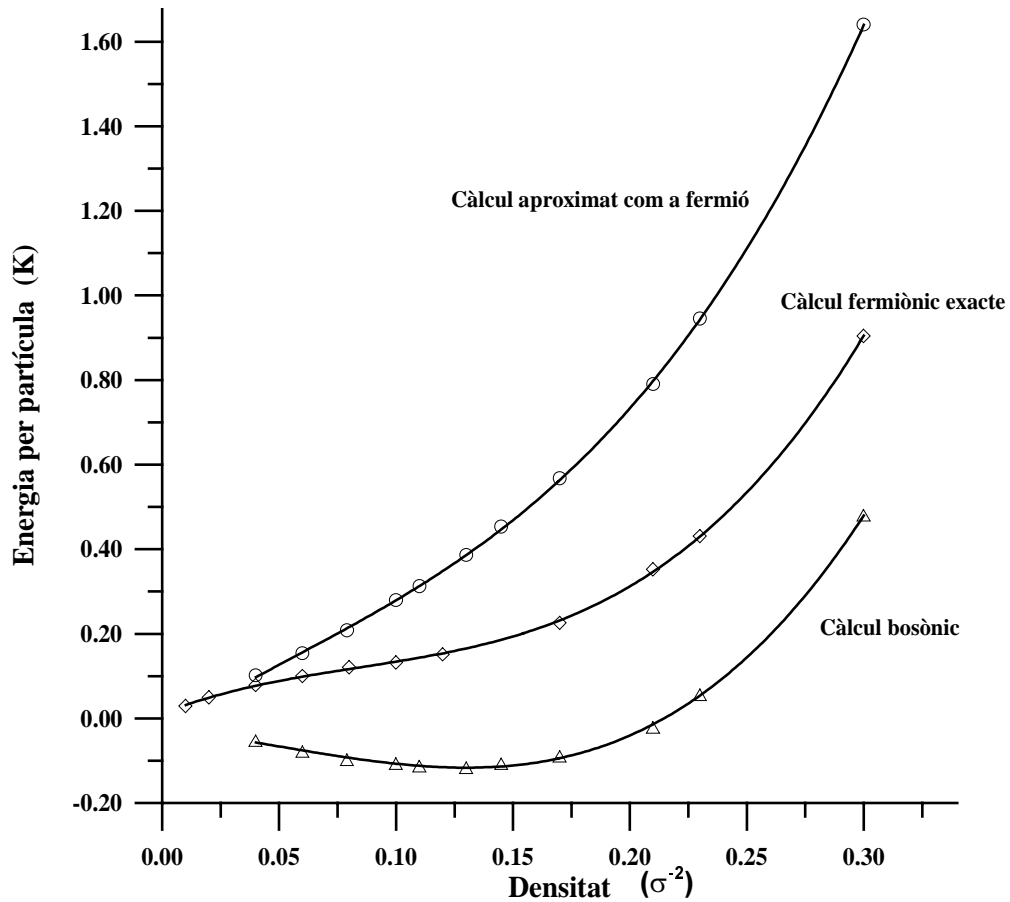


Figura 12.4

Resultats comparats per a les descripcions bosònica, fermiònica aproximada i amb el determinant d'Slater sense backflow. Corresponen a un sistema d' ^3He normal amb 58 àtoms.

la qual cosa permet extreure'n informació sobre pressió, velocitat del so i compressibilitat a través de les relacions:

$$P = \rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{E}{N} \right) \quad c^2 = \frac{1}{m} \frac{\partial P}{\partial \rho} \quad \frac{1}{\kappa} = \rho \frac{\partial P}{\partial \rho} \quad (12.5)$$

L'anàlisi d'aquestes quantitats, així com la de les funcions $g(r)$, $S(k)$ i de la massa efectiva es deixen per a una anàlisi posterior amb la inclusió del backflow, ja que les diferències són molt petites. Només en els casos d'interès es comparen les dues descripcions.