Apèndix A

Càlcul de les cues d'energia cinètica i potencial.

Es calcula a continuació la contribució a l'energia del primer dels tres sumands $\frac{\nabla^2\Psi_S}{\Psi_S}$ definits a l'apartat 2.5. D'acord amb l'aproximació feta l'aportació a l'energia de les partícules properes és la calculada en el programa de simulació, i per a descriure el sistema infinit {S}, s'avaluen les contribucions de les partícules més llunyanes integrant des de $L/2$ fins a ∞. El valor de l'energia, ja sigui potencial o cinètica, és modulat per la funció *g(r)*, que dóna la probabilitat de trobar dues partícules separades per una distància determinada. D'aquesta manera les expressions per a les cues d'energia cinètica i potencial quedaràn com segueix:

cua d'energia potencial

$$\langle V \rangle_{cua} = \frac{1}{2}\rho \int g(r) V(r) d\vec{r}$$

cua d'energia cinètica

$$\langle T \rangle_{cua} = -\frac{\hbar^2}{2m}\rho \int g(r) \frac{\nabla^2\Psi}{\Psi} d\vec{r}$$

Càlcul de la cua d'energia potencial.

A llargues distàncies la funció g(r) tendeix a 1, i com que calcular la cua del potencial és avaluar aquesta integral a grans distàncies, l'expressió es reduirà a:

$$\langle V \rangle_{cua} = \frac{1}{2}\rho \int g(r) V(r) d\vec{r} \cong \frac{1}{2}\rho \int V(r) d\vec{r}$$

Quan l'apliquem a sistemes de 2 i 3 dimensions es converteix respectivament en:

$$\langle V \rangle_{cua}^{3D} = \frac{1}{2}\rho \int_R^\infty V(r) d\vec{r} = \frac{1}{2}\rho 4\pi \int_R^\infty V(r) r^2 dr$$

$$\langle V \rangle_{cua}^{2D} = \frac{1}{2}\rho \int_R^\infty V(r) d\vec{r} = \frac{1}{2}\rho 2\pi \int_R^\infty V(r) r dr$$

El potencial emprat ha estat l'Aziz II, una versió revisada del potencial d'Aziz. La seva expressió, que ve detallada al capítol 3 és la següent:

$$V(x) = \varepsilon\left[Ae^{-\alpha x+\beta x^2} - F(x)\sum_{j=0}^{2}\frac{C_{2j+6}}{x^{2j+6}}\right]$$

El fet de calcular les integrals del potencial a grans distàncies ens permet simplificar també l'integrant. Així per $x \to \infty$ l'exponencial del primer sumant pot negligir-se, i la funció F(x) (d'acord amb la definició donada al capítol 3) es reduirà a la unitat, quedant com expressió aproximada del potencial:

$$V(r) = -\varepsilon\left[\frac{C_6}{x^6} + \frac{C_8}{x^8} + \frac{C_{10}}{x^{10}}\right]$$

Cua d'energia potencial en el sistema tridimensional.

Amb les simplificacions anteriors el resultat per a la cua serà:

$$\langle V\rangle_{cua}^{3D} = 2\pi\rho\int_{R/r_m}^{\infty} -\varepsilon\left[\frac{C_6}{x^6} + \frac{C_8}{x^8} + \frac{C_{10}}{x^{10}}\right]r_m^2x^2r_m dr = -\rho\varepsilon 2\pi r_m^6\left[\frac{C_6}{3R^3} + \frac{C_8r_m^2}{5R^5} + \frac{C_{10}r_m^4}{7R^7}\right]$$

On totes les quantitats han estat definides amb el potencial.

Cua d'energia potencial en el sistema bidimensional.

En aquest cas l'expressió a integrar ens porta a:

$$\langle V\rangle_{cua}^{2D} = \pi\rho\int_{R/r_m}^{\infty} -\varepsilon\left[\frac{C_6}{x^6} + \frac{C_8}{x^8} + \frac{C_{10}}{x^{10}}\right]r_m x r_m dr = -\rho\varepsilon\pi r_m^6\left[\frac{C_6}{4R^4} + \frac{C_8r_m^2}{6R^6} + \frac{C_{10}r_m^4}{8R^8}\right]$$

Càlcul de la cua d'energia cinètica.

Per a calcular aquesta expressió la transformarem de la següent manera:

A l'integral de partida

$$\langle T\rangle_{cua} = -\frac{\hbar^2}{2m}\rho\int g(r)\frac{\nabla^2\Psi}{\Psi}d\vec{r}$$

es desenvolupa el quocient de l'integrant de manera que un dels sumands pot negligir-se quan es consideren grans distàncies:

$$\frac{\nabla^2\Psi}{\Psi} = \frac{1}{\Psi}\nabla(\nabla\Psi) = \frac{1}{\Psi}\nabla(\frac{1}{2}\vec{F}\Psi) = \frac{1}{\Psi}\frac{1}{2}(\nabla\Psi)\Psi + \frac{1}{\Psi}\frac{1}{2}\vec{F}(\nabla\Psi)$$

$$\frac{\nabla^2\Psi}{\Psi} = \frac{1}{2}\nabla\vec{F} + \frac{1}{4}\vec{F}\cdot\vec{F}$$

Amb la funció d'ona emprada:

$$\Psi(r) = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{b}{r}\right)^5}$$

veiem que el primer sumant és d'ordre r^{-6}, en tant que el segon és un terme d'ordre r^{-10}. Aquest segon doncs, serà negligible a grans distàncies. Essent el primer de llarg abast, és l'únic que aporta una contribució a les cues d'energia cinètica. D'aquesta manera l'expressió per a les cues es converteix en:

$$\langle T \rangle_{cua} = -\frac{\hbar^2}{2m}\rho \int_R^\infty \frac{1}{2} \nabla \vec{F} d\vec{r}$$

Cua de l'energia cinètica en el sistema tridimensional.

Usualment es defineix $v(r) = (\frac{b}{r})^5$

En termes d'aquesta funció l'expressió per a la component *a* de la força serà:

$$F^a = 2v'(r)\frac{r^a}{r}$$

i l'integrant quedarà:

$$\frac{1}{2}\nabla F = \frac{1}{2}\left(-v''(r) - \frac{2}{r}v'(r)\right) = \frac{1}{2}\left(-30\frac{b^5}{r^7} + \frac{10}{r}\frac{b^5}{r^7}\right) = -10\frac{b^5}{r^7}$$

I la cua:

$$\langle T \rangle_{cua} = -\frac{\hbar^2}{2m}\rho \int_R^\infty \frac{1}{2} \nabla \vec{F} d\vec{r} = -\frac{\hbar^2}{2m}\rho \int_R^\infty -10\frac{b^5}{r^7} 4\pi r^2 dr = \frac{\hbar^2}{2m}\rho 10 \frac{b^5}{2} 4\pi \int_R^\infty \frac{dr}{r^5} =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} 10 \rho \pi R \left(\frac{b}{R}\right)^5$$

Cua d'energia cinètica en el sistema bidimensional.

Ara l'integrant té la següent expressió:

$$\frac{1}{2}\nabla F = \frac{1}{2}\left(-v''(r) - \frac{1}{r}v'(r)\right) = -\frac{25}{2}\frac{b^5}{r^7}$$

quedant per a la cua:

$$\langle T \rangle_{cua} = -\frac{\hbar^2}{2m}\rho\int_R^\infty \frac{1}{2}\nabla\vec{F}d\vec{r} = -\frac{\hbar^2}{2m}\rho\int_R^\infty -\frac{25}{2}\frac{b^5}{r^6}2\pi dr = \frac{\hbar^2}{2m}\rho\frac{25}{10}\frac{b^5}{R^5}2\pi =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}5\rho\pi\left(\frac{b}{R}\right)^5$$

El valor de les cues en el sistema tridimensional és considerable, per a la caixa amb 66 partícules els valors calculats amb el mètode descrit són:

Cua total	-0.4934 K
Cua d'energia potencial	-0.7267 K
Cua d'energia cinètica	0.2333 K

Taula E.1

Cues d'energia per al sistema *N=66*

Per al sistema de 54 partícules els valors es fan més grans:

Cua total	-0.5864 K
Cua d'energia potencial	-0.8913 K
Cua d'energia cinètica	0.3049 K

Taula E.2

Cues d'energia per al sistema *N=54*