

Estudi de l' ^3He bidimensional amb mètodes de Monte Carlo quàntics

Víctor Grau Torre-Marin

Departament de Física i Enginyeria Nuclear



Estudi de l'³He bidimensional amb mètodes de Monte Carlo quàntics

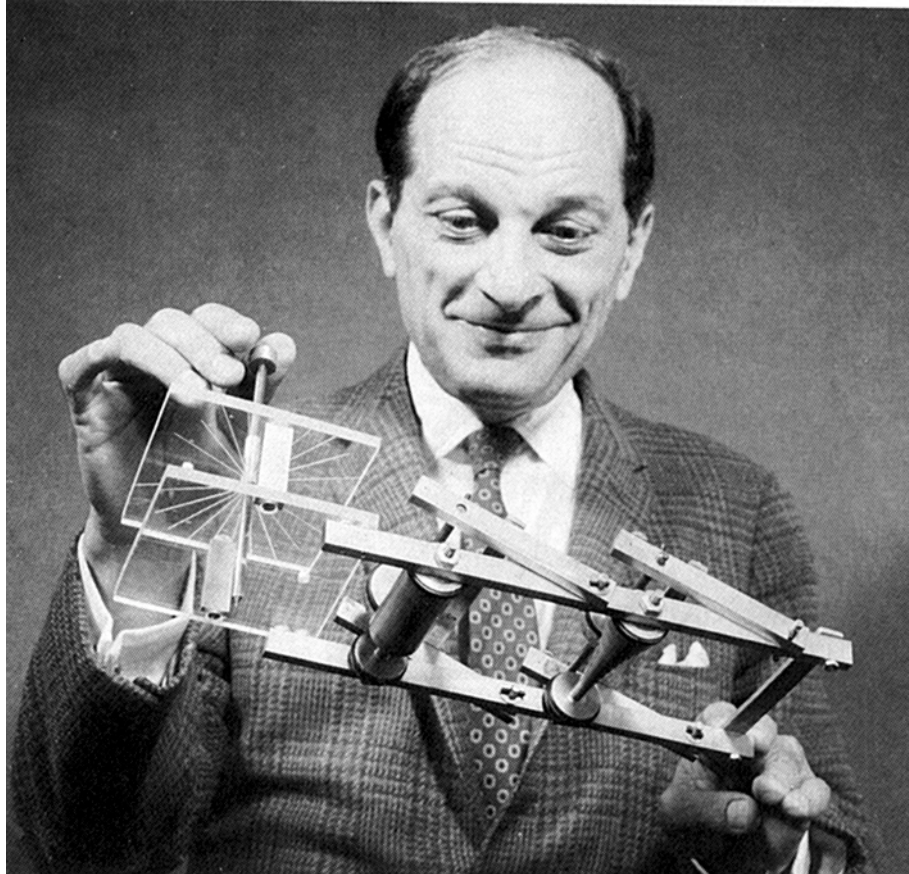
Memòria presentada per
Víctor Grau Torre-Marín
Per optar al grau de Doctor en Ciències Físiques

Barcelona, juny 2001

Programa de doctorat
Física Aplicada i Simulació en Ciències
del Departament de Física i Enginyeria Nuclear
Universitat Politècnica de Catalunya

Directors de la tesi: Jordi Boronat Medico
Joaquim Casulleras Ambros





Stanislaw Ulam amb el FERMIAC, un carretó Monte Carlo dissenyat per Fermi l'any 1947 per a simular la difusió de neutrons

Per a tu Mariona, per què passen coses en aquesta vida que només comprenen aquells a qui succeeixen. Als meus pares, i als meus germans. També al Guillem, que acaba de començar en aquest món, i a l'Esther, que ja va començar fa temps.

A tots els amics i amigues que formen o han format part de la meua vida, i amb qui tantes coses he compartit.

Índex

	Agraïments	iv
	Presentació i objectius del treball	v
Part 0	Introducció	1
	I. Resum històric del mètode de Monte Carlo	1
	II. L'heli líquid	4
Part 1	Els mètodes de Monte Carlo en l'estudi de l'³He	8
Capítol	1. El mètode de Monte Carlo i l'heli líquid	8
	2. Les tècniques de càlcul	13
	2.1. La simulació Monte Carlo	14
	2.2. L' <i>importance sampling</i>	15
	2.3. L'algorisme de Metrópolis	16
	2.4. El mètode de Monte Carlo variacional	18
	2.5. El mètode de Monte Carlo difusiu	22
	2.6. Mètode dels nodes fixos i de relaxació de nodes	27
	2.7. Estratègia combinada FN-RN	30
	2.8. Estimadors	32
	2.9. Simulació de sistemes d'infinites partícules	34
	2.10. Estimació de l'energia per a sistemes infinits	37
Part 2	Estudi de l'³He en 3D	44
Capítol	3. Introducció. Pla de l'estudi	44
	4. El potencial	47
	4.1. Descripció del potencial emprat	47
	4.2. Comparació entre els potencials Aziz i Aziz II en l' ³ He	49
	5. Funcions de correlació a dos cossos	51
	6. Les correlacions a tres cossos	56
	7. Les correlacions de backflow	61
	8. Termes correctius a les correlacions de backflow.....	69
	8.1. El desenvolupament	69
	8.2. Consideracions sobre els nous termes obtinguts	71
	8.3. El càlcul aproximat dels nous termes	73
	8.4. Anàlisi exacte dels nous termes implementats	74
	9. Modificació de la funció de Jastrow	80

Part 3	Estudi de l'³He en 2D	84
Capítol		
10.	Introducció	84
10.1.	La descripció de l' ³ He 2D. Breu resum dels estudis fets en el sistema bidimensional	85
10.2.	Pla de l'estudi	86
11.	L' ³ He bidimensional com a sistema bosònic	88
12.	L' ³ He normal	91
12.1.	Primera aproximació al sistema fermiònic	91
12.2.	Inclusió de l'antisimetria en la descripció de l' ³ He	93
13.	L' ³ He normal amb correlacions de backflow	98
13.1.	Optimització de les constants de backflow	98
13.2.	Estudi en densitats	100
13.3.	Càlcul aproximat de la massa efectiva	106
13.4.	Anàlisi d'algunes propietats del sistema: pressió, compressibilitat i velocitat del so	109
13.5.	La funció distribució radial a dos cossos $g(r)$	112
13.6.	Estudi de la dependència en densitat de la constant de backflow	116
14.	L' ³ He normal a molt baixa densitat	117
15.	Estudi de l' ³ He bidimensional totalment polaritzat	119
15.1.	Tria i optimització dels paràmetres	119
15.2.	L'energia de Fermi en el sistema bidimensional polaritzat	119
15.3.	Estudi en densitats del sistema polaritzat sense backflow	120
15.4.	Introducció del backflow en el sistema polaritzat	122
15.5.	Comparació entre els sistemes normal i polaritzat	126
15.6.	Propietats del sistema: pressió, compressibilitat i velocitat del so	129
15.7.	Càlcul aproximat de la massa efectiva	133
15.8.	La funció $g(r)$	134
16.	Estudi de l' ³ He bidimensional parcialment polaritzat	137
16.1.	Planteig: elecció dels sistemes a calcular	138
16.2.	Càlcul dels paràmetres per a cada grau de polarització	139
16.3.	L'energia de Fermi en els sistemes parcialment polaritzats	140
16.4.	Resultats per a l'energia	141
16.5.	Propietats del sistema: pressió, compressibilitat, velocitat del so i potencial químic	146
16.6.	Susceptibilitat magnètica del sistema	155
	Conclusions	165

Apèndixs

Apèndix A

Càlcul de les cues d'energia cinètica i potencial 168

Apèndix B

Taules d'energia de Fermi per als sistemes parcialment polaritzats 172

Apèndix C

Desenvolupament analític de la contribució a l'energia de les
correlacions a tres cossos 173

Apèndix D

Deducció analítica del backflow 180

Apèndix E

Desenvolupament analític de la contribució a l'energia de les
correlacions de backflow i correccions 186

Apèndix F

La funció de Jastrow modificada 201

Apèndix G

Les funcions $g(r)$ i $S(k)$ del sistema bidimensional sense interacció 205

Apèndix H

Correcció de les taules de la funció η de backflow 207

Referències

209

Agraïments

En primer lloc vull agrair al Departament d'Enginyeria Mecànica les facilitats que m'ha posat per poder acabar aquesta tesi, estímuls com aquest son ben escassos dins el món universitari.

Evidentment agrair les orientacions i treball d'en Jordi i en Quim, els quals no només m'han guiat des del principi en aquesta tesi, sinó que també han dedicat moltes hores a les parts més àrides del treball: repassar llarguissims càlculs i programes, tasques que mai no s'escriuen.

Un especial agraïment a la Carme i en Jaume per tot el seu ajut, portàtil o no, i que no ha estat poc, gràcies. També al Xavi, perquè potser sense saber-ho ha estat un bon estímulo per acabar el treball: ara ja podem sortir a muntanya.

Altres persones m'han ajudat al llarg d'aquests anys, ja sigui humana o tècnicament. La Muntsa, amb la seva detallada lectura d'algunes parts del text i el seu suport. La Montse i en Josep, quan tots tres érem encara doctorands a Terrassa. En Jordi, per la seva bona disposició a corregir-me un text que després no he tingut temps de passar-li. Els companys de departament, que m'han ofert el seu ajut a les meves preguntes sobre word, zips, adobes, illustrators, mathematica, ... i tot el bestiar informàtic que ronda pels pc's. I no voldria deixar d'esmentar el Ferran i l'Assum, que en aquells temps també hi van tenir el seu paper.

També vull agrair el que correspongui a totes aquelles persones que ara, a quarts de dues de la matinada, no he inclòs, i que de ben segur recordaré un cop impresa la tesi.

Presentació i objectius del treball

L' ^3He és un dels líquids quàntics que ha estat estudiat més exhaustivament, però no per això ha deixat de perdre interès. A hores d'ara els sistemes de dimensionalitat reduïda encara han estat poc estudiats, restant obertes moltes qüestions.

En aquest treball es presenta un estudi de l' ^3He a temperatura zero amb les tècniques de Monte Carlo quàntiques, estudi que compren tant aspectes del sistema homogeni tridimensional com del sistema bidimensional.

El treball s'estructura de la forma següent.

En una part prèvia (part 0) es presenten les característiques físiques més rellevants de l'heli líquid i una revisió històrica tant del seu estudi com de les tècniques de Monte Carlo.

En la primera part del treball s'exposen en detall els mètodes de càlcul emprats, on després d'explicar els fonaments dels mètodes de Monte Carlo usats, s'expliquen les correccions a l'energia degut al tamany finit dels sistemes simulats i la tècnica combinada nodes fixos (FN)- relaxació de nodes (RN). Les correccions a l'energia introduïdes en aquest treball permeten reduir molt els efectes de mida degut al nombre finit de partícules usat a la simulació, i la tècnica combinada FN-RN permet assegurar que les dades obtingudes són efectivament molt properes al valor exacte.

L'objectiu d'aquesta part és doncs, establir un conjunt de tècniques de càlcul que ens permetin donar amb seguretat valors representatius del sistemes realment infinits, obtenint una mesura de la qualitat de la funció d'ona usada com a *importance sampling*.

L'estudi variacional de l' ^3He tridimensional ocupa la part 2 del treball. En ella, i en l'intent de millorar les energies obtingudes, es presenta una anàlisi variacional en la que es valora la introducció de nous mecanismes de correlació a la funció d'ona.

L'objectiu d'aquesta part és doble: per una banda investigar la importància de cadascun dels mecanismes de correlació, i per altra confirmar el correcte funcionament dels programes que serviran de base per a calcular el sistema bidimensional. El sistema bidimensional és molt desconegut, i existeixen poques dades en la literatura científica amb les que poder establir comparacions.

La tercera part del treball s'ocupa del sistema estrictament bidimensional. Fent ús del mètode difusiu es calcula l'energia del sistema i algunes de les seves propietats, cobrint tot el rang de polaritzacions entre 0 i 1 i el rang de densitats fins al valor pel qual els resultats experimentals semblen indicar una possible solidificació.

Es planteja com a objectiu genèric d'aquesta part obtenir resultats per a un sistema teòric calculats amb precisió que serveixi coma referència per a estudis posteriors més realistes, en els que es pugui valorar, per exemple, la influència del substrat.

Com a objectius més concrets es plantegen:

- a. deduir l'equació d'estat del sistema, i establir amb seguretat si es tracta d'una fase líquida o gasosa
- b. calcular algunes propietats importants del sistema no polaritzat
- c. estudiar el sistema totalment polaritzat, valorant la importància que hi tenen les correlacions de backflow
- d. encetar l'estudi del sistema a polarització variable, comparant les seves propietats amb les de l' ^3He normal
- e. investigar la possible existència d'una fase metamagnètica