

6. Les correlacions a tres cossos.

En sistemes poc densos és suficient incloure el terme de correlacions a dos cossos, però en ser l' ^3He un sistema d'alta densitat i fortament correlacionat és necessari incloure correlacions a tres cossos per a obtenir una descripció adequada. El model descrit al capítol anterior dóna valors de l'energia encara molt llunyans als experimentals, i la inclusió de correlacions a tres cossos, tant a l' ^3He com a l' ^4He , redueix apreciablement aquestes diferències [SKLC80], [SLKC81]. Les correlacions de triplet passen doncs, a ser un ingredient imprescindible per a una acurada descripció de l'heli.

D'aquesta forma, la funció d'ona de l' ^3He : $\Psi(1, \dots, N) = F(\vec{R})\Phi(1, \dots, N)$ tindrà una part simètrica definida per:

$$F_{JT}(\vec{R}) = \prod_{i < j=1}^N f(r_{ij}) \prod_{i < j < k=1}^N f^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \quad (6.1)$$

En els càlculs Monte Carlo s'adopta la funció proposada per Schmidt, Kalos, Lee i Chester [SKLC80] que té la forma:

$$F_{JT} = \prod_{i < j} e^{-v(r_{ij})} \prod_l e^{-\frac{\lambda_l}{4} \vec{G}(l)^2} \quad (6.1)$$

en ella les funcions \vec{G} i $v(r_{ij})$ es defineixen:

$$\vec{G}(l) = \sum_{i \neq l} \chi(r_{il}) \vec{r}_{il} \quad (6.3)$$

$$v(r_{ij}) = \frac{1}{2} u(r_{ij}) - \frac{\lambda}{2} \chi^2(r_{ij}) r_{ij}^2 \quad (6.4)$$

i la funció $u(r_{ij})$ és el pseudopotencial definit al capítol anterior, que ens descriu la interacció a dos cossos. En el present treball s'ha usat la funció $\chi(r_{ij})$

$$\chi(r_{il}) = \exp \left\{ - \left(\frac{r_{il} - r_t}{r_\omega} \right)^2 \right\} \quad (6.5)$$

amb r_t i r_ω constants a determinar, i $\vec{r}_{il} = \vec{r}_i - \vec{r}_l$.

La introducció de les correlacions a tres cossos comporta canvis notables en les expressions de l'energia. La deducció analítica dels nous termes és llarga i complexa, i s'ha detallat a l'apèndix C.

En l'optimització de les constants de triplet s'ha fet ús del mètode *simplex*, i el resultat ha estat coincident amb el conjunt de paràmetres proposats a l'article de Panoff i Carlson [PC89]:

$$\lambda_t = -1.80 \quad r_t = 0.66\sigma \quad \omega_t = 0.50\sigma \quad (6.6)$$

En el present treball s'ha fet els càlculs amb 54 i 66 partícules, tots ells amb el potencial Aziz II i incloent-hi la correcció de l'energia de Fermi, de forma que pràcticament s'elimina la dependència de l'energia en N . Les millors energies obtingudes han estat les següents:

	<i>McMillan</i>	<i>Reatto</i>	<i>McMillan i triplet</i>	<i>Reatto i triplet</i>
E_c (K)	13.27±0.02	13.33±0.05	12.85±0.03	13.09±0.04
V (K)	-14.36±0.03	-14.55±0.04	-14.35±0.03	-14.63±0.04
E (K)	-1.08±0.03	-1.21±0.04	-1.49±0.02	-1.54±0.02

Taula 6.1

Millors fites obtingudes en l'energia per partícula amb correlacions a dos i tres cossos

El descens en l'energia total ocasionat per la inclusió del triplet és major quan s'aplica sobre una descripció McMillan que sobre una descripció a dos cossos de Reatto. Pot veure's a la taula anterior que aquest descens és de l'ordre de 0.41K en el primer cas, i de tan sols 0.33K en el segon cas.

Quelcom similar passa amb l'energia cinètica, que disminueix de 0.42K en incloure el triplet a la funció McMillan, però només 0.24K quan hi es present la funció de Reatto.

També destaca el fet que l'energia potencial per partícula disminueix en, mes o menys, 0.2K en incloure la funció de Reatto, en tant que es mostra molt poc sensible a la inclusió del triplet.

A continuació s'ha fet la mateixa comparació que per a les correlacions a dos cossos, consistent a calcular el sistema amb el mateix potencial que les referències (el potencial HFDHE2). Els resultats apareixen a la taula 6.2:

	McMillan i triplet	Reatto i triplet
E (K)	-1.37 ± 0.02	-1.42 ± 0.02
	(-1.47)	(-1.52)
[SLKC81]	-1.61 ± 0.03	-
[MFS95] Òptima a dos cossos	-1.709 ± 0.017	-
[Ar92] McMillan+T	-1.69	-
[Ar92] Parametrització d'Euler	-1.80	-

Taula 6.2

Comparació entre diferents resultats variacional incloent correlacions a dos i tres cossos i el potencial HFDHE2. Entre parèntesi s'indica el resultat sense la correcció de l'energia de Fermi. Energies expressades en K.

S'observa a la taula que la diferència entre els valors de les referències i els calculats aquí són més grans que les que hi havia en les correlacions a dos cossos. Si es compara amb els valors sense la correcció d'energia de Fermi la diferència disminueix, però segueix essent bastant gran. Per exemple, comparant amb Schmidt *et al.* [SLKC81], aquesta diferència és encara de -0.14K en el cas de McMillan i de -0.09K per a la funció de Reatto. El motiu d'aquesta diferència pot ser la presència d'una funció de tall en la funció $\chi(r_{ij})$ que Schmidt *et al.* introdueixen en el seu treball. El terme de tall és un factor que fa que $\chi(r_{ij})$ sigui exactament la unitat per $r = R_t = L/2$:

$$\chi(r_{ij}) = \begin{cases} \left(\frac{r_{ij} - R_t}{R_t} \right)^3 \exp \left\{ - \left(\frac{r_{ij} - s_t}{\omega_t} \right)^2 \right\} & , r_{ij} \leq R_t \\ 0 & , r_{ij} > R_t \end{cases} \quad (6.7)$$

A distàncies intermitjes les dues funcions són molt diferents, com es veu en la figura 6.1. En aquesta figura es representa la funció $\chi(r_{ij})$ (incorporant el factor $\lambda_i^{1/2}$, òptim per a cada cas).

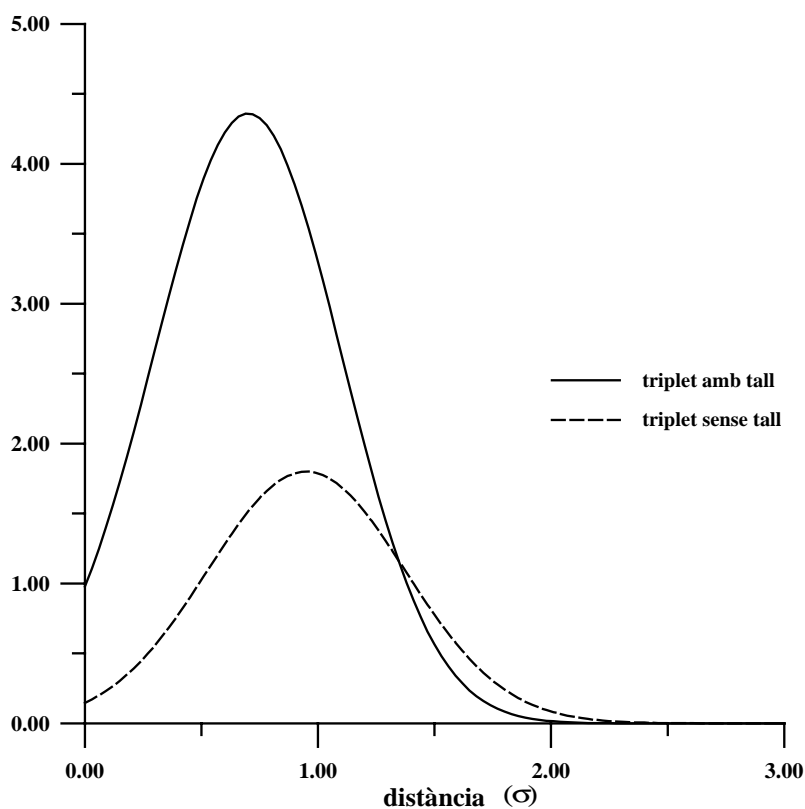


Figura 6.1

Representació de les funcions de correlació amb i sense tall corresponents als paràmetres de SLKC81.

L'efecte d'aquesta funció depèn de la mida de la caixa R_i , i és progressivament menor en augmentar aquesta. Tot i que possiblement millora els resultats de l'energia, s'ha preferit usar un triplet independent del nombre de partícules de la simulació. Per aquest motiu s'ha fet servir el triplet sense tall, ja que el que es desitja és trobar uns valors representatius del sistema infinit.

Finalment s'ha reproduït la taula de la referència [SKLC81] calculant sobre el sistema de 54 partícules amb la mateixa funció de triplet amb tall, i sense afegir la correcció a l'energia de Fermi. En aquest cas els resultats amb triplet coincideixen plenament. Aquest fet reforça l'anterior afirmació de que l'origen en l'augment de la discrepància respecte al resultat calculat aquí té el seu origen en l'ús de la funció de tall.

McMillan+triplet	
SLKC81	-1.61 ± 0.03
McMillan+T	-1.59 ± 0.01

Taula 6.3

Reproducció dels resultats amb triplet obtinguts a la referència [SKLC81]. Energies expressades en K.