

## 4. El potencial.

### 4.1. Descripció del potencial emprat.

El potencial interatòmic de l' $^3\text{He}$  és el mateix que el de l' $^4\text{He}$ . Això és degut a que l'estructura electrònica és la mateixa.

L'any 1976 Ahlrichs et al. [APS76] proposaven un potencial que millorava el potencial de Lennard-Jones que s'havia emprat fins al moment. La forma d'aquests dos potencials és molt similar. El potencial de Lennard-Jones és més repulsiu a curtes distàncies, però presenta un mínim més petit que el potencial d'Aziz. Per altra banda, i com pot veure's a la seva expressió

$$V(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (4.1)$$

el potencial de Lennard-Jones divergeix a distància zero, en tant que Aziz tendeix a un valor finit.

Si el potencial és conegut pel nom d'Aziz i no pel d'Ahlrichs, és perquè l'any 1979 Aziz et al. [ANCTM79] en van fer una acurada determinació dels paràmetres, obtenint un molt bon acord amb les dades experimentals del moment.

El potencial d'Aziz va permetre reproduir molt exactament les propietats estructurals i energètiques de l'He durant quasi una dècada. Però càlculs Monte Carlo publicats per Ceperley i Partridge l'any 1986 [CP86] indicaven que aquest potencial és excessivament repulsiu a distàncies menors que  $1.8 \text{ \AA}$ . Per altra banda també s'hi van veure petites inconsistències en els càlculs dels coeficients de transport i del segon virial. Per aquests motius l'any 1987 Aziz, McCourt i Wong [AMW87] feren una revisió del potencial, proposant el que s'anomena potencial d'Aziz II o potencial HFD-B(HE).

El potencial HFD-B(HE) es diferencia de l'anterior per la introducció d'un nou terme per a descriure millor el curt abast, i per alguns canvis en els valors dels paràmetres. Aquestes petites diferències originen un potencial amb un mínim una mica més profund i

situat també a una menor distància interatòmica. Així, mentres que el potencial Aziz té el seu mínim a:

$$r_m = 1.1608\sigma, \quad V = 10.80K \quad (4.2)$$

el potencial Aziz II el té situat a:

$$r_m = 1.1592\sigma, \quad V = 10.95K \quad (4.3)$$

Les expressions d'aquests potencials són:

- Potencial d'Aziz (HFDHE2):

$$V(r) = \varepsilon \left[ A \exp(-\alpha x) - F(x) \sum_{j=0}^2 \frac{C_{2j+6}}{x^{2j+6}} \right] \quad (4.4)$$

amb les següents definicions i valors:

$$F(x) = \begin{cases} \exp\left[-\left(\frac{D}{x} - 1\right)^2\right] & x < D \\ 1 & x \geq D \end{cases} \quad (4.5)$$

$$x = \frac{r}{r_m}$$

$$\varepsilon = 10.8, \quad r_m = 2.9673, \quad \alpha = 13.353384, \quad A = 0.5448504 \times 10^6$$

$$D = 1.241314, \quad C_6 = 1.3732412, \quad C_8 = 0.4253785, \quad C_{10} = 0.1781$$

- Potencial d'Aziz II (HFD-B(HE)):

$$V(r) = \varepsilon \left[ A \exp(-\alpha x + \beta x^2) - F(x) \sum_{j=0}^2 \frac{C_{2j+6}}{x^{2j+6}} \right] \quad (4.6)$$

amb les mateixes definicions per a  $F(x)$  i  $x$ , i amb constants:

$$\varepsilon = 10.948, \quad r_m = 2.963, \quad \alpha = 10.43329537, \quad \beta = -2.27965105, \quad A = 1.8443101 \times 10^5$$

$$D = 1.4826, \quad C_6 = 1.36745214, \quad C_8 = 0.42123807, \quad C_{10} = 0.17473318$$

Una anàlisi comparativa entre aquests dos potencials mitjançant càlculs QDMC aplicats a l' $^4\text{He}$  es pot trobar a la referència [BC94]. A l'article es corrobora una millora tant en l'energia per partícula com, sobretot, en el càlcul de la pressió i la compressibilitat en funció de la densitat. El descens en energia que obtenen en canviar el potencial d'Aziz per l'Aziz II és prou rellevant, oscil·lant entre  $-0.15K$  i  $-0.25K$  segons la densitat (taula 3B.1). El bon acord entre els càlculs teòrics i les dades experimentals porten a considerar l'ús de l'Aziz II en el present estudi.

$\rho$ ( $\sigma^{-3}$ )	$\Delta(E/N)$ (K)
0.328	-0.162±0.023
0.365	-0.146±0.023
0.401	-0.258±0.029
0.424	-0.181±0.046
0.438	-0.238±0.037
0.490	-0.212±0.050

Taula 4.1

Descens en l'energia per partícula en l' $^4\text{He}$  en substituir el potencial d'Aziz pel Aziz II (extret de [BC94])

## 4.2. Comparació entre els potencials Aziz i Aziz II en l' $^3\text{He}$ .

No existeix cap referència on es comparin els potencials d'Aziz i d'Aziz II aplicats a l' $^3\text{He}$ . Això ha fet necessari, abans de començar l'estudi d'aquest sistema, comprovar si efectivament també el potencial Aziz II millora l'energia variacional en l' $^3\text{He}$ .

S'ha fet una anàlisi comparativa usant diferents nombres de partícules i funcions de prova (veure capítol 5). Així mateix s'ha comprovat que en el sistema polaritzat el potencial Aziz II segueix tenint els mateixos efectes.

L'anàlisi feta amb 66 partícules a la densitat d'equilibri  $\rho = 0.277\sigma^{-3}$ , amb una descripció McMillan per al terme a dos cossos, mostra un descens de  $-0.10K$  en substituir Aziz per Aziz II. Un descens similar s'observa quan s'inclou el terme de Reatto a la funció d'ona:  $-0.13K$ .

Dades molt similars s'obtenen en fer l'anàlisi a la mateixa densitat amb la funció de Reatto i afegint correlacions de triplet i backflow. A més, la millora introduïda pel canvi de potencial mostra ser independent del grau de polarització, i de valor  $-0.125K$ .

Aquesta anàlisi confirma que al igual que en l' ${}^4\text{He}$ , també en l' ${}^3\text{He}$  el potencial HFD-B(HE) proporciona millors cotes a l'energia sigui quina sigui la funció d'ona emprada. S'ha comprovat que en tots els casos el potencial Aziz II aporta una reducció de l'ordre d'una dècima de Kelvin respecte al potencial HFDHE2.