

## 7. Les correlacions de backflow.

Les correlacions de backflow foren introduïdes en l'estudi de l'espectre d'excitació de l' $^4\text{He}$  l'any 1956 per Feynman i Cohen [FC56], i van suposar una millora quantitativa rellevant sobre el model de Feynman. En el líquid bosònic van proposar una senzilla interpretació del seu significat: quan un àtom es mou en una direcció, per a mantenir la densitat constant cal que hi hagi un petit flux d'àtoms en direcció contrària. Sorgeix així una interacció a tres cossos que provocarà un moviment complicat dels àtoms que envoltaven al primer [Bo91].

En l' $^3\text{He}$  les correlacions de backflow van ser introduïdes per Schmidt i Pandharipande [SP79] l'any 1979. Però la senzilla explicació vàlida per a l' $^4\text{He}$  no és, com a mínim, extensible de forma immediata al líquid fermiònic. Com podem interpretar les correlacions de backflow? Vegem-ne una interpretació vàlida per a sistemes fermiònics en interacció.

Considerem la relació entre les funcions d'ona corresponents a dos sistemes descrits per la mateixa interacció, però subjectes a estadístiques bosònica i fermiònica respectivament. En particular, suposem que en el cas del sistema bosònic tenim una solució analítica molt propera a la funció exacta, i ens proposem construir-ne una de qualitat similar per al sistema fermiònic. En aquesta anàlisi hi juga un paper central l'energia local generada per les funcions d'ona que busquem. Si com s'ha dit, la solució simètrica  $\Psi_S(\vec{R})$  per al sistema bosònic és molt bona, la corresponent energia local:

$$E_L^S = -D \frac{\vec{\nabla}^2 \Psi_S(\vec{R})}{\Psi_S(\vec{R})} + V(\vec{R}) \quad (7.1)$$

és molt propera a una constant. En particular això implica que la funció simètrica ha de tenir curvatura molt important a la regió on el potencial és divergent.

Quan es passa a considerar la funció d'ona del sistema fermiònic, cal aconseguir que l'energia local corresponent sigui pràcticament constant. D'altra banda la funció d'ona total  $\Psi_A(\vec{R})$  ha de ser antisimètrica. És factible combinar ambdues característiques amb

l'ajut de la solució exacta coneguda  $\Psi_F(\vec{R})$  d'un sistema fermiònic sense interacció (gas de Fermi), es verifica una condició equivalent:

$$E_F = -D \frac{\vec{\nabla}^2 \Psi_F(\vec{R})}{\Psi_F(\vec{R})} = \text{constant} \quad (7.2)$$

La funció  $\Psi_F(\vec{R})$  té la mínima curvatura compatible amb l'alternança de signe requerida pel fet de ser antisimètrica. Si considerem ara el potencial  $V(\vec{R})$  que conté un *hard core* divergent, la curvatura de la funció d'ona s'ha de modificar fins a valors molt importants per a poder cancel·lar de nou aquestes divergències. És clara doncs la necessitat de dotar a la funció d'ona total (que serà antisimètrica)  $\Psi_A(\vec{R})$ , d'una estructura de la forma:

$$\Psi_A(\vec{R}) = \Psi_F(\vec{R}) \cdot \Psi_S(\vec{R}) \quad (7.3)$$

ja que d'aquesta manera s'asseguren les condicions d'antisimetria i de cancel·lació de les divergències del potencial. En efecte, l'energia local resultant es pot escriure com:

$$\begin{aligned} E_L &= -D \frac{\vec{\nabla}^2 \Psi_A(\vec{R})}{\Psi_A(\vec{R})} + V(\vec{R}) = \\ &= -D \frac{\vec{\nabla}^2 \Psi_F(\vec{R})}{\Psi_F(\vec{R})} - D \frac{\vec{\nabla}^2 \Psi_S(\vec{R})}{\Psi_S(\vec{R})} + V(\vec{R}) - 2D \frac{\vec{\nabla} \Psi_F(\vec{R})}{\Psi_F(\vec{R})} \frac{\vec{\nabla} \Psi_S(\vec{R})}{\Psi_S(\vec{R})} = \\ &= E_F + E_L^S(\vec{R}) - 2D \frac{\vec{\nabla} \Psi_F}{\Psi_F} \frac{\vec{\nabla} \Psi_S}{\Psi_S} \end{aligned} \quad (7.4)$$

on les divergències del potencial han estat aproximadament cancel·lades per la contribució cinètica (de curvatura) de  $\Psi_S(\vec{R})$ . En canvi la forma de  $\Psi_A(\vec{R})$  introdueix una conseqüència no desitjada: prop de la superfície nodal en general es verificarà simultàniament  $\vec{\nabla} \Psi_F(\vec{R}) \approx \text{constant}$  i  $\Psi_F(\vec{R}) \approx 0$ , i per tant el terme  $\frac{\vec{\nabla} \Psi_F}{\Psi_F}$  presenta una divergència.

Amb tot, aquest tipus de divergència és més favorable que la que s'obtidria sense incloure  $\Psi_S(\vec{R})$  a (7.3), ja que s'ha canviat la divergència del potencial per la divergència

$\frac{\vec{\nabla}\Psi_F}{\Psi_F} \frac{\vec{\nabla}\Psi_S}{\Psi_S}$  que canvia de signe en travessar la superfície nodal, i per tant la seva contribució neta a l'energia es cancel·la en part. De totes maneres la seva presència a (7.4) indica que la forma (7.3) introduïda s'ha de modificar. Pot intuir-se quina és la modificació que cal fer a partir de l'evolució dictada per la mateixa equació de Schrödinger: definint l'evolució de  $\Psi(\vec{R}, t)$  a partir de l'equació i prenent  $\Psi(\vec{R}, t=0) = \Psi_S(\vec{R})\Psi_A(\vec{R})$ , s'obté una funció millorada que podem escriure com  $\exp(-Ht)\Psi(\vec{R}, t=0)$ . Aquesta acció origina una modificació de la funció d'ona que correspon a mantenir la forma (7.3), però introduint un desplaçament a l'argument de la part antisimètrica:

$$\Psi_A(\vec{R}) = \Psi_F(\vec{\tilde{R}}) \cdot \Psi_S(\vec{R}) \quad (7.5)$$

amb  $\vec{\tilde{R}} = \vec{R} + C \frac{\vec{\nabla}\Psi_S(\vec{R})}{\Psi_S(\vec{R})}$ , que correspon a desplaçar la regió nodal.

Aquesta modificació és deguda a la presència simultània de la funció  $\Psi_S(\vec{R})$  originada pel potencial i de la superfície nodal imposada per l'estadística fermiònica.

Tot aquest procés de modificació de la superfície nodal pot ser interpretat relacionant-lo amb el que succeeix en un càlcul Monte Carlo amb relaxació de nodes. En ell els *walkers* pertanyents a la zona propera a la superfície nodal on la divergència d' $E_L$  és negativa tendeixen a reproduir-se. Suposem, sense pèrdua de generalitat, que en aquesta zona  $\Psi_F(\vec{R})$  és positiva. A l'altra banda de la superfície nodal, en canvi, on la divergència d' $E_L$  és positiva, els *walkers* tendeixen a desaparèixer, indicant que el valor negatiu inicial de  $\Psi_F(\vec{R})$  en aquesta zona també està desapareixent. La desproporció de *walkers* a una banda i altra de la superfície nodal original, juntament amb el procés de difusió consegüent, portarà a que els *walkers* representants de  $\Psi_F(\vec{R})$  de la zona positiva arribin a envair i dominar la zona contrària propera, provocant efectivament el desplaçament de la superfície nodal.

Una manera alternativa d'obtenir el backflow a partir de l'equació de Schrödinger és escrivint la funció d'ona complexa com a producte d'una fase per mòdul. L'equació d'Schrödinger corresponent es separa també en una part per a la fase i una altra pel mòdul. Les equacions obtingudes permeten anar introduint, de forma iterativa, nous termes correctius a la fase de partida. L'interès resideix en l'equació de la fase, deixant a banda la del mòdul, ja que partint d'una ona plana s'obté com a primer terme correctiu el backflow. Si després es fa servir el backflow com a entrada, s'obté tot un conjunt de nous termes. La novetat d'aquests termes és el que en fa atractiu el seu estudi, als quals es dedica el següent capítol. A grans trets el desenvolupament és com segueix.

Partint de la funció d'ona escrita com a producte d'una fase i un mòdul:

$$\Psi(\vec{R}, t) = e^{i\Omega(\vec{R}, t)} \Phi(\vec{R}, t) \quad (7.6)$$

i introduint-la a l'equació de Schrödinger

$$-\frac{\partial \Psi(R, t)}{\partial t} = (-D\nabla_R^2 + V(r) - E)\Psi(R, t) \quad (7.7)$$

s'obtenen dues equacions acoblades, una corresponent al mòdul i l'altra a la fase, amb

$D = \frac{\hbar^2}{2m}$ . L'equació corresponent al mòdul és:

$$-\frac{\partial \Phi}{\partial t} = D(\nabla_{\vec{R}} \Omega)^2 \Phi - D(\nabla_{\vec{R}}^2 \Phi) + (V(\vec{R}) - E)\Phi \quad (7.8)$$

i la corresponent a la fase:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial t} = D \left[ (\nabla_{\vec{R}}^2 \Omega) + 2(\nabla_{\vec{R}} \Omega) \frac{(\nabla_{\vec{R}} \Phi)}{\Phi} \right] \quad (7.9)$$

Aquesta darrera es pot entendre com una via per a millorar la fase  $\Omega$  inclosa inicialment a la funció d'ona. Si a aquesta l'anomenem  $\Omega_0$ , una primera correcció es podria escriure:

$$\Omega = \Omega_0 + \tau \frac{\partial \Omega_0}{\partial t} \quad (7.10)$$

Així, si en aquesta equació prenem  $\Omega_0$  com la fase corresponent a una ona plana:  $\Omega_0 = \vec{k}\vec{r}$ , la fase  $\Omega$  que en resulta és la coneguda expressió corresponent al backflow:

$$\Omega = \Omega_0 + \tau D 2 \vec{k} \sum_{i \neq k} u'(r_{ki}) \frac{\vec{r}_{ki}}{r_{ki}} = \sum_k \vec{k} \left( \vec{r}_k + \lambda_B \sum_{i \neq k} \eta(r_{ki}) \vec{r}_{ki} \right) \quad (7.11)$$

on s'han reunit totes les constants en una de sola:  $\lambda_B$

En aquest capítol s'estudia l'efecte que té el backflow sobre l'energia, i s'optimitzen els paràmetres per a trobar la millor funció d'ona, deixant les deduccions detallades per als apèndixs D i E. A l'apèndix D s'explica pas a pas el mètode iteratiu aplicat a l'equació de Schrödinger [BC97]. L'aportació del backflow a l'energia cinètica ve deduïda a l'apèndix E.

D'acord amb la transformació deduïda per a la fase, la manera d'incorporar el backflow a la funció d'ona és substituint les coordenades  $\{\tilde{r}_i^a\}$  de les ones planes per unes noves coordenades modificades  $\{\tilde{r}_i^a\}$  en la següent forma:

$$\exp\{i\vec{k}_i \vec{r}_j\} \rightarrow \exp\left\{i\vec{k}_i \left( \vec{r}_j + \lambda_B \sum_{k \neq j} \eta(r_{kj}) \vec{r}_{kj} \right)\right\} \quad (7.12)$$

$$\eta(r_{kj}) = \exp\left\{-\left(\frac{r_{kj} - r_B}{\omega_B}\right)^2\right\} \quad (7.13)$$

en la qual  $\lambda_B$ ,  $\omega_B$ ,  $r_B$  són paràmetres variacionals. La primera d'elles,  $\lambda_B$ , és la que té uns efectes més importants en el càlcul de l'energia, i per tant la que ha estat necessari optimitzar amb més cura. En endavant serà a ella a la que es faci referència quan es parli de la constant de backflow.

Notem que en l'equació (7.13) hem substituït  $\eta = \frac{u'}{r}$  per una gaussianiana. La raó és que la gaussianiana no té la divergència no desitjada que apareix en la funció  $\left(\frac{u'}{r}\right)$  per a  $r \rightarrow 0$ , és de curt abast i a mig rang s'assembla a  $\left(\frac{u'}{r}\right)$ .

L'optimització de les constants  $r_B$  i  $\Omega_B$  no ha donat diferències respecte els valors habitualment considerats. Els valors obtinguts han estat:

$$\omega_B = 0.54\sigma \quad r_B = 0.75\sigma \quad (7.14)$$

molt propers als que poden trobar-se a les referències [SLKC81] o [PC89]

La novetat ha estat en l'optimització de  $\lambda_B$ . Habitualment se li assigna el valor 0.14, però s'ha pogut comprovar que existeix un profund mínim local situat a  $\lambda_B = 0.34$ .

A continuació es tabula el resultat obtingut amb els paràmetres òptims. El sistema conté 66 partícules, el potencial HFD-B(HE) i correlacions de Reatto, triplet i backflow. A efectes de comparació s'hi inclouen les millors fites obtingudes a dos i tres cossos.

	<i>Reatto</i>	<i>Reatto i triplet</i>	<i>Reatto i backflow</i>	<i>Reatto, triplet i backflow</i>
$E_c$ (K)	13.33±0.05	13.09±0.04	12.98±0.05	
$V$ (K)	-14.55±0.04	-14.63±0.04	-14.64±0.04	
$E$ (K)	-1.21±0.04	-1.54±0.02	-1.65±0.04	-2.03±0.01

Taula 7.1

Millors resultats obtinguts amb correlacions de backflow i de tres i dos cossos.

L'optimització de la constant de backflow ha significat una millora de més o menys una dècima de Kelvin respecte al valor obtingut amb el paràmetre sense optimitzar. D'aquesta manera la inclusió del backflow a la descripció Reatto provoca un descens en l'energia de 0.44K, bastant més gran que no pas el produït per la inclusió de correlacions a tres cossos: 0.33K. L'efecte d'incloure ambdós mecanismes simultàniament és aproximadament el que s'espera cas que no hi hagi cancel·lacions entre ells: 0.82K.

A la taula 7.2 es tornen a calcular aquests valors amb el potencial HFDHE2 per tal de comparar-los amb treballs previs. Potser la diferència més remarcable és que en aquests

treballs la interacció a tres cossos sembla haver estat sobrevalorada. Així, a la referència [SLKC81] la millora aportada pel backflow és  $0.07K$  inferior a l'aportada pel triplet, i a [MFS95] es troba una situació paral·lela, en que el triplet millora en  $0.05K$  l'aportació del backflow. En aquest estudi es comprova la situació contrària: evitant els factors de tall en el triplet i el backflow (ja que depenen de la mida de la caixa) i amb una correcta optimització de la constant de backflow, aquest millora en  $0.11K$  el descens en l'energia capaç d'ocasionar la inclusió de correlacions a tres cossos.

	<i>Reatto i backflow</i>	<i>Mcmillan i backflow</i>	<i>Reatto, triplet i backflow</i>	<i>McMillan, triplet i backflow</i>
<i>E (K)</i>	$-1.53 \pm 0.04$ (-1.62)	-	$-1.91 \pm 0.01$ (-2.00)	-
<i>[SLKC81]</i>	-	$-1.55 \pm 0.04$	-	$-1.91 \pm 0.03$
<i>[MFS95] Òptima a dos cossos</i>	-	$-1.659 \pm 0.021$	-	$-2.163 \pm 0.006$
<i>[Ar92] Òptima a dos cossos</i>	-	-1.55	-	-2.00

Taula 7.2

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

Finalment s'ha simulat el mateix sistema de la referència [SLKC81] en un intent de reproduir-ne els resultats. S'han emprat per tant 54 partícules, el potencial HFDHE2, les funcions de triplet i backflow amb tall i els mateixos paràmetres, i no s'ha inclòs la correcció a l'energia de Fermi. Els resultats es donen a la taula 7.3.

	<i>McMillan+B</i>	<i>McMillan+T+B</i>
<i>E (K)</i>	-1.56±0.05	-1.83±0.06
<i>E (K) [SLKC81]</i>	-1.55±0.04	-1.91±0.03

Taula 7.3

Reproducció dels resultats amb backflow de la referència [SLKC81]