

Conclusions

En aquest treball s'ha realitzat un estudi de ^3He a temperatura zero combinant els mètodes de Monte Carlo variacional (VMC) i difusiu (DMC). Aquest darrer s'ha utilitzat tant en l'aproximació de nodes fixos (FN) com mitjançant la de tècnica de relaxació dels nodes (RN).

Des del punt de vista dels mètodes de càlcul emprats, s'han desenvolupat una sèrie de tècniques, entre les que podríem destacar el càlcul d'estimadors purs i l'avaluació dels efectes de tamany finit del sistema, qüestions per a les quals s'ha obtingut una tècnica senzilla i eficient que proporciona resultats molt satisfactoris. D'altra banda, estudiat una combinació de desenvolupaments analítics i numèrics a partir de les tècniques FN-RN, que han permès d'obtenir, en general, una mesura de la proximitat al valor exacte dels resultats FN, i en els càlculs presentats en aquest treball, arribar a minimitzar de forma efectiva la influència de la superfície nodal fins a la precisió estadística, similar a la de sistemes bosònics. Això representa, a la pràctica, haver resolt de forma suficientment acurada el problema del signe per als sistemes que han estat objectes d'estudi.

Pel que fa als resultats obtinguts en el sistema d' ^3He en 3D, hem analitzat la influència sobre l'energia de cadascun dels mecanismes de correlació emprats, comparant amb altres resultats ja existents a la literatura. En destaca l'optimització de la funció de backflow, que condueix a uns resultats clarament millors. S'ha estudiat a nivell variacional la introducció de nous mecanismes de correlació a la funció d'ona, mostrant que la introducció de correccions d'ordre superior al backflow són irrellevants.

En l'estudi del sistema d' ^3He bidimensional amb el mètode DMC, s'ha calculat l'equació d'estat del sistema a polarització variable, avaluant els efectes que hi tenen les interaccions de backflow. Els resultats han mostrat que el sistema no posseeix cap estat auto-lligat. S'ha calculat després el sistema a polarització variable analitzant algunes propietats físiques. Els valors obtinguts de la susceptibilitat magnètica apunten l'existència d'una transició de fase magnètica.

En particular, una relació concreta dels principals resultats obtinguts podria ser la següent:

³He tridimensional

El potencial

1. L'energia per partícula de l'³He líquid calculada amb el potencial HFD-B(HE) és 0.125K menor que l'obtinguda amb el potencial HFDHE2

Correlacions a dos cossos en el sistema tridimensional

- 2.1. La descripció a dos cossos proporciona un resultat compatible amb el subministrat per SLKC81 si no s'inclou la correcció a l'energia de Fermi, si s'inclou l'energia augmenta en 0.1K.
- 2.2. En aquesta descripció el terme de Reatto redueix en 0.1K l'energia per partícula. Aquest descens és comparable a l'obtingut amb funcions òptimes.

Correlacions de triplet en el sistema tridimensional

- 3.1. L'ús de correlacions de triplet sense tall proporciona uns valors de l'energia total majors que els obtinguts introduint el tall, però s'han preferit per la seva independència en N .
- 3.2. El descens d'energia ocasionat per la inclusió del triplet és major quan s'aplica sobre la descripció McMillan que sobre la descripció amb Reatto.

Correlacions de backflow en el sistema tridimensional

- 4.1. S'ha aconseguit optimitzar millor la constant de backflow, fixant el seu valor en $\lambda_B = 0.34$.
- 4.2. La inclusió simultània de correlacions de triplet i backflow provoca un descens en l'energia que és molt aproximadament la suma del que provoca cadascun d'ells per separat. Pràcticament no s'observen cancel·lacions entre els seus efectes.

Correccions a la interacció de backflow

- 5.1. La introducció de termes correctius al backflow només té un efecte visible si no s'ha optimitzat convenientment la constant de backflow.
- 5.2. L'ús de la correcta constant de backflow ($\lambda_B = 0.34$) iguala els efectes que es poden obtenir incloent aquelles correccions.

Funció de Jastrow modificada

6. La modificació de la funció de Jastrow amb el mètode proposat al capítol 9 no proporciona cap millora significativa a l'energia variacional obtinguda.

³He bidimensional

Equació d'estat del sistema bidimensional

1. La correcta descripció del sistema necessita de la inclusió exacta de l'antisimetria. La seva inclusió aproximada és incapaç de reproduir convenientment l'estructura de la corba (ϵ - ρ), que és responsable de les característiques físiques deduïdes pel sistema.
2. El sistema bidimensional ideal infinit es presenta en estat gasós.

Correlacions de backflow

3. El backflow té uns efectes molt menors sobre el sistema polaritzat que sobre el normal. A diferència del sistema tridimensional, no és imprescindible la seva inclusió per situar el sistema polaritzat a energies superiors a les del sistema normal.

Propietats físiques

4. A baixes i mitjanes densitats la polarització del sistema altera molt la pressió, compressibilitat i velocitat del so, que mostren comportaments anòmals amb la densitat.
5. S'observa un fort pic en la susceptibilitat del sistema a baixes densitats quan la polarització és de l'ordre de 50%.
6. El canvi en la susceptibilitat suggereix l'existència d'una nova fase magnètica, que podria ser la responsable dels singulars comportaments observats en les propietats del sistema.