

Apèndix H

Correcció de les taules de la funció η de backflow

La funció η de backflow ha estat tabulada i la constant de backflow és la òptima per a aquesta forma de la funció, que només conté índexs de dues partícules. Si es modifiqués aquesta descripció a dos índexs caldria evidentment, no només refer les taules, també tornar a optimitzar la constant de backflow.

A l'apèndix C s'ha inclòs correccions a la part antisimètrica de la funció d'ona que aporten efectes a 3 partícules. Es pretén afegir aquests nous termes sense alterar els resultats obtinguts per al backflow. Ara bé, si es mira la forma dels nous termes inclosos a la fase :

$$\sum_{k \neq j} \eta(r_{jk}) \cdot \sum_{l \neq j} \eta(r_{jl}) \vec{r}_{jl}$$

$$\sum_{k \neq j} \beta(r_{jk}) r_{jk}^a r_{jk}^b \cdot \sum_{l \neq j} \eta(r_{jl}) r_{jl}^b$$

pot succeir que els índexs k i l coincideixin, i això suposaria incloure nous termes a dues partícules. Com que acceptem que la descripció a dos cossos ja és correcta, s'hauran d'eliminar aquestes contribucions.

Per exemple quan es fan càlculs afegint la segona correcció, si $k=l$ apareixerà el terme:

$$\sum_{k=1}^N \beta(r_{jk}) \eta(r_{jk}) r_{jk}^2 r_{jk}^a$$

que conté només les partícules j i k . Per eliminar-lo es pot incloure amb signe negatiu en la construcció de les taules de η , construint així les noves taules de la funció i les seves derivades:

$$\bar{\eta}(r_{ij}) = \eta(r_{ij}) - \lambda_N \beta(r_{ij}) \eta(r_{ij}) r_{ij}^2 = \eta(r_{ij}) (1 - \lambda_N \beta(r_{ij}) r_{ij}^2)$$

$$\bar{\eta}'(r_{ij}) = \eta'(r_{ij}) (1 - \lambda_N \beta(r_{ij}) r_{ij}^2) - \lambda_N \eta(r_{ij}) r_{ij} (\beta'(r_{ij}) r_{ij} + 2\beta(r_{ij}))$$

$$\bar{\eta}''(r_{ij}) = \eta''(r_{ij}) (1 - \lambda_N \beta(r_{ij}) r_{ij}^2) - \lambda_N \eta'(r_{ij}) (2\beta'(r_{ij}) r_{ij}^2 + 4\beta(r_{ij}) r_{ij}) -$$

$$-\lambda_N \eta(r_{ij}) (\beta'(r_{ij}) r_{ij}^2 + 4\beta'(r_{ij}) r_{ij} + 2\beta(r_{ij}))$$

La constant s'ha indicat com a λ_N per a diferenciar-la de la constant de backflow, ja que segons hagi estat la construcció del programa pot haver-hi algun factor de diferència.

En el cas que es vulgui introduir la primera correcció també cal tenir present que s'ha d'eliminar el cas $k=l$, que dóna contribucions de la forma:

$$\sum_{k=1}^N \eta(r_{jk})^2 r_{jk}^a$$

En aquest cas per eliminar els termes no desitjats cal redefinir la funció com:

$$\bar{\eta}(r_{ij}) = \eta(r_{ij}) - \lambda_N \eta(r_{ij})^2 = \eta(r_{ij}) (1 - \lambda_N \eta(r_{ij}))$$

La constant d'aquest cas, tot i usar el mateix nom, no coincideix amb la de la correcció anterior.