

Part 3

Estudi de l' ^3He en dues dimensions

10. Introducció

Els estudis sobre l'estat termodinàmic de l' ^3He bidimensional han estat fins ara poc concloents a l'hora de determinar si existia o no una fase líquida, tot i que els resultats han indicat gaire bé sempre una resposta negativa.

Els treballs experimentals es centren sobretot en l'estudi de capes d'heli no polaritzat sobre un substrat : [MBG95], [MBBBFG96], [BBCFG988], [Gr90], [VHJH88], [ESEFG75]. En aquests sistemes la interacció ^3He -substrat és molt important per a definir l'estat en que es trobarà l'heli, perquè les energies de lligam amb les que es treballa són molt petites, i els canvis introduïts pel substrat poden ser determinants.

El model quàntic estrictament bidimensional, és a dir, sense cap substrat que li serveixi de suport, no ha estat prou estudiat. Tot i tractar-se d'un model teòric, el coneixement de les seves propietats pot permetre una millor comprensió del comportament de les capes d'heli sobre un substrat, i el paper que aquest hi juga.

Alguns dels càlculs variacionals fets sobre l' ^3He bidimensional són els referenciats a [NC75] i [BJL94]. Sovint no s'inclou de forma rigorosa l'estadística fermiònica, com a [MN78] i [KC99]. En KC99, per exemple, es fa un càlcul bosònic, incorporant l'estadística fermiònica afegint simplement el valor de l'energia de Fermi. Tot i que aquest és el terme

més important, es mostrarà en aquest treball que aquesta aproximació queda lluny de descriure acuradament el sistema.

Així, degut a les tècniques de càlcul emprades, les conclusions a que arriben aquests treballs previs, tot i donar clares indicacions que el sistema roman en estat gasos, no són prou acurades com per donar uns valors que puguin considerar-se definitius.

El present estudi pretén donar un pas endavant en la resolució del problema, obtenint per al sistema d' ^3He 2D uns valors més acurats. Un dels primers objectius és decidir sense ambigüitats si el sistema bidimensional presenta o no un estat auto-lligat.

Amb aquest objectiu s'ha preferit emprar càlculs DMC. El desavantatge del mètode variacional és que amb ell només s'obté una cota superior al valor de l'energia. Certament aquesta cota pot ser molt propera al valor real, però en tot cas no hi ha cap indicació de com de propera és al valor real. Pel contrari s'espera que el mètode difusiu doni un resultat molt més acurat que es pugui considerar quasi exacte. Els resultats així obtinguts es comproven amb el mètode ja explicat que combina FN i RN (apartat 2.9).

10.1 La descripció de ^3He 2D. Breu resum dels estudis fets en el sistema bidimensional.

L'any 1975 Novaco i Campbell feren un estudi dels efectes d'un substrat cristal·lí sobre una capa bidimensional d'heli líquid [NC75]. En els seus càlculs resolien de forma aproximada les equacions d'Euler-Lagrange. Era un treball centrat especialment en ^4He , però van fer també l'estudi de ^3He . Per poder estudiar ^3He van canviar la massa de les partícules i van afegir l'energia de Fermi, la correcció d'ordre més baix de l'estadística fermiònica. Aquests càlculs aproximats els van portar a concloure que probablement ^3He mai presentava un estat lligat en dues dimensions.

Miller i Nosanov [MN78], en un dels primers estudis variacionals sobre heli bidimensional, arribaren també a la mateixa conclusió.

Una anàlisi una mica diferent del sistema fou realitzada l'any 1993. L'estudi publicat per Brami, Joly i Lhuillier [BJL94] mostrava que sobre un substrat de grafit, i per a un cert rang de densitats, si que s'hi podia formar una capa bidimensional d' ^3He líquid. És l'únic resultat en aquest sentit. Aquest estudi introdueix una novetat respecte als anteriors, que consisteix en donar un cert gruix a la capa amb el que anomenen model 2D1/2, degut a la peculiar forma d'introduir aquesta tercera dimensió. La deslocalització dels àtoms en la direcció perpendicular al pla d'adsorció sembla afavorir suficientment la possibilitat d'arribar a formar un estat líquid.

Posteriorment, l'any 1995, Godfrin i Lauter [GL95] dugueren a terme una sèrie d'experiments de ressonància magnètica nuclear en monocapes d' ^3He sobre un substrat de grafit. El que observaren fou que no existia cap fase líquida en la primera capa, i que, en augmentar-ne el gruix, aquesta fase de gas dens passava a sòlid.

Un altre càlcul teòric ha estat fet l'any 1999 per Krishnamachari i Chester [KC99]. Els seus resultats tornaven a confirmar resultats anteriors, ja que tampoc van trobar una fase líquida. Inferien d'aquest estudi que ni la monocapa d'heli ni el sistema bidimensional pur poseien un estat auto-lligat. Ara bé, com en altres casos les seves conclusions sobre ^3He es basaven en els càlculs fets en l'aproximació bosònica.

10.2 Pla de l'estudi

Igual com s'ha fet a l'estudi del sistema tridimensional, en cada cas, després d'una optimització variacional dels paràmetres de la funció d'ona, es donen els resultats DMC per a l'energia de l'estat fonamental.

En primer lloc s'estudia, al capítol 11, el sistema bosònic.

Al capítol 12 s'inclou l'estadística del sistema. Primer de forma aproximada. A partir del sistema bosònic, i per addició de l'energia de Fermi, s'obté a l'apartat 12.1 una primera corba que descriu aproximadament el sistema fermiònic no polaritzat.

La resta del capítol, l'apartat 12.2, es dedica al càlcul del sistema fermiònic incloent-hi de forma explícita l'antisimetria.

A aquesta descripció s'hi afegeix, en el capítol 13, les correlacions de backflow i s'avalua la seva influència a diferents densitats. La possibilitat d'una dependència de la constant de backflow amb la densitat també s'analitza en l'apartat 13.6. Seguint la metodologia plantejada en aquest treball, es corrobora la validesa de les energies obtinguts en els càlculs difusius fent l'anàlisi amb el mètode de relaxació dels nodes.

El capítol 14 explora el sistema normal a molt baixes densitats.

A continuació (capítol 15) es descriu el sistema totalment polaritzat, i se'n calculen algunes de les seves propietats comparant-les amb les del sistema normal.

Finalment s'inicia al capítol 16 l'estudi de l'heli a polaritzacions intermitjes. Emprant polaritzacions del 55%, 19% i 76% es calculen diverses propietats que són comparades amb els sistemes normal i polaritzat.