

## 11. $L^3\text{He}$ bidimensional com a sistema bosònic.

Una primera descripció que hom pot pensar per a calcular de forma aproximada el sistema bidimensional, és considerar-lo com a bosònic. En aquesta aproximació es calcula el sistema com si fos  $^4\text{He}$  però amb la massa de  $L^3\text{He}$ . L'interès d'aquesta anàlisi resideix en que dóna la possibilitat de veure la importància del paper de l'estadística fermiònica en el sistema. Com es veurà al comparar amb el sistema fermiònic, hi ha grans diferències entre ambdós, i els resultats obtinguts en l'aproximació bosònica són força allunyats de la realitat.

Per a construir el programa de càlcul DMC del sistema bidimensional s'ha partit del programa DMC en 3D. Es manté l'estructura global del programa, modificant el càlcul dels moments i les expressions de l'energia. Així mateix s'ha fet amb el programa variacional del sistema 3D, obtenint un variacional en 2D que ha estat emprat en l'optimització dels paràmetres.

La funció de correlació emprada en el tractament com a bosò és del tipus Mcmillan. En ella el paràmetre més rellevant és la constant  $b$ , la mateixa que apareixia en la part Jastrow del sistema tridimensional. Així doncs, se n'ha fet una anàlisi variacional per a trobar el valor de la  $b$  òptima.

L'optimització variacional ha estat feta amb el sistema de 64 partícules a la densitat  $\rho = 0.10\sigma^{-2}$ , i els resultats mostren un mínim molt clar a prop del valor  $b = 1.19$  (taula 11.1) que serà el valor emprat en els càlculs.

$b$	$E/N$ (K)
1.12	$0.5311 \pm 0.011$
1.15	$0.3013 \pm 0.008$
1.18	$0.2292 \pm 0.007$
1.19	$0.2199 \pm 0.007$
1.21	$0.2329 \pm 0.007$
1.24	$0.3085 \pm 0.008$

Taula 11.1

Optimització de la constant  $b$  per al sistema bosònic

Un cop optimitzat el valor de la constant  $b$  s'estudia la dependència en densitat de l'energia. El marge de densitats calculades s'ha triat coincident amb l'amplada de l'anàlisi que es farà sobre el sistema vertaderament fermiònic, limitant l'estudi a densitats inferiors a  $0.30\sigma^{-2}$  ja que les dades experimentals indiquen que al voltant d'aquesta densitat podria produir-se la solidificació del sistema.

L'anàlisi ha estat feta amb 64 àtoms i una població mitjana de 150 *walkers*. Els resultats obtinguts es mostren a la taula 11.2. Els resultats inclouen les cues d'energia (apartat 2.5).

$\rho$ ( $\sigma^2$ )	$E/N$ (K)		
		0.130	$-0.1167 \pm 0.007$
0.040	$-0.0530 \pm 0.001$	0.145	$-0.1075 \pm 0.002$
0.060	$-0.0785 \pm 0.0005$	0.170	$-0.0899 \pm 0.002$
0.079	$-0.0976 \pm 0.001$	0.210	$-0.0217 \pm 0.001$
0.100	$-0.1070 \pm 0.001$	0.230	$+0.0557 \pm 0.004$
0.110	$-0.1129 \pm 0.001$	0.300	$+0.4805 \pm 0.004$

Taula 11.2

Energia per partícula en el sistema d' $^3\text{He}$  bosònic

La corba mostra una forma molt semblant a la de l' $^4\text{He}$  [BC96]. A baixes densitats el sistema té una energia negativa, amb un mínim situat a una densitat de  $\rho = 0.13\sigma^{-2}$ .

La presència del mínim a valors negatius de l'energia indica l'existència d'un estat lligat, però, com es veurà al capítol 13, el sistema fermiònic bidimensional no té cap estat lligat, i en els sistemes reals, que corresponen a capes d' $^3\text{He}$  sobre un substrat, només ha estat predit en un dels treballs: [BJL94], contràriament a les previsions de la resta d'estudis [NC75],[ MN78], [GL95], [KC99].

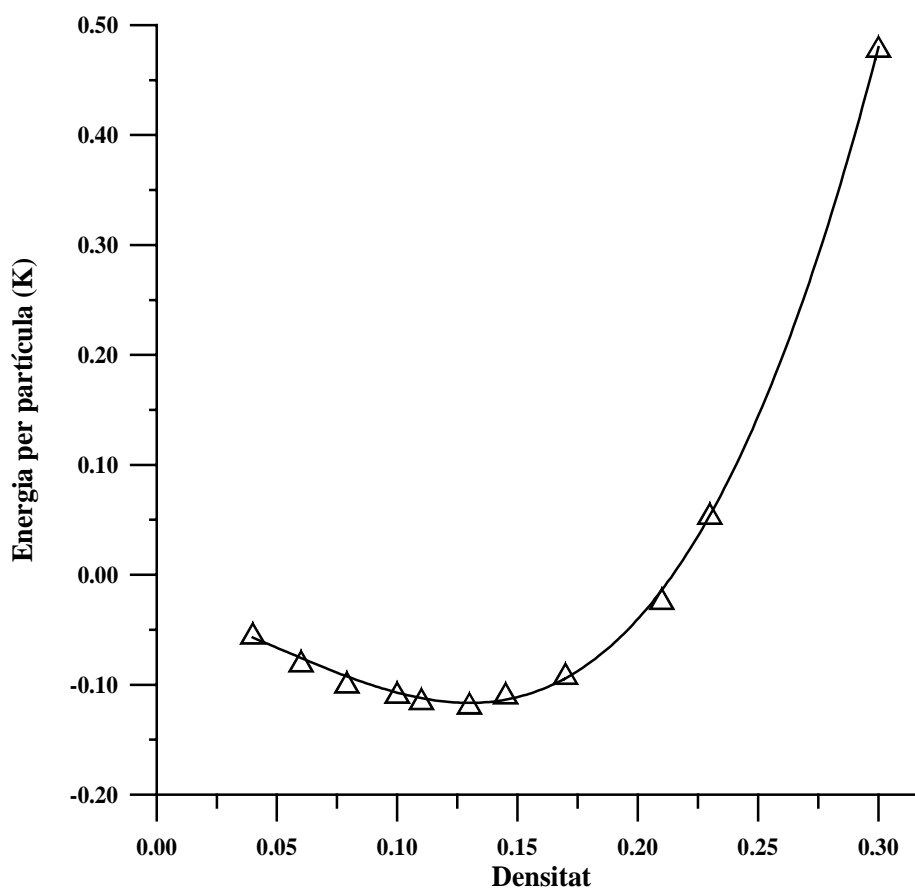


Figura 11.1

Energia (K) en funció de la densitat ( $\sigma^2$ ) del  $^3\text{He}$  bosònic