

## 13. L'heli normal amb correlacions de backflow.

Funcionalment l'expressió de les correlacions de backflow en el sistema bidimensional és la mateixa que tenen en el sistema tridimensional. Les úniques diferències resideixen en la dimensionalitat dels vectors que hi intervenen i els valors de les constants.

Primer s'optimitzen variacionalment cadascuna de les tres constants del backflow:  $\lambda_B$ ,  $\Omega_B$ ,  $S_B$ . A continuació s'inclouen els resultats per l'energia obtinguts amb el conjunt òptim de valors, resultats que són després comprovats amb el mètode de la relaxació dels nodes. Finalment s'avaluen diverses propietats del sistema: funció de distribució radial, massa efectiva, velocitat del so, etc., comparant alguns d'aquests valors amb els obtinguts sense backflow o en el sistema sense interacció. D'aquesta manera es pot valorar quina és la importància de les correlacions de backflow, i comparar després amb el sistema polaritzat.

### 13.1 Optimització de les constants de backflow.

Igual que en el sistema 3D, en el sistema 2D la constant  $\lambda_B$  mostra ser la més rellevant de la terna  $(\lambda_B, \Omega_B, S_B)$  que apareix en la funció de backflow. El seu valor òptim es veu clarament afectat pel canvi de dimensió del sistema, les altres dues en canvi, a penes canvien i mantenen el valor que ja tenien a 3D.

Totes les optimitzacions s'han fet a la densitat  $\rho = 0.1\sigma^{-2}$ , i han consistit en una escombrada variacional dels valors de cadascun dels paràmetres, prenent com a valor de partida per a l'exploració el valor òptim conegut a 3D.

Per a la constant  $\lambda_B$ , que representa el màxim de la gaussiana els resultats obtinguts són els il·lustrats a la figura 13.1. S'hi pot ajustar fàcilment una paràbola, de la qual se'n dedueix la posició del valor òptim:  $\lambda_B \cong 0.40$

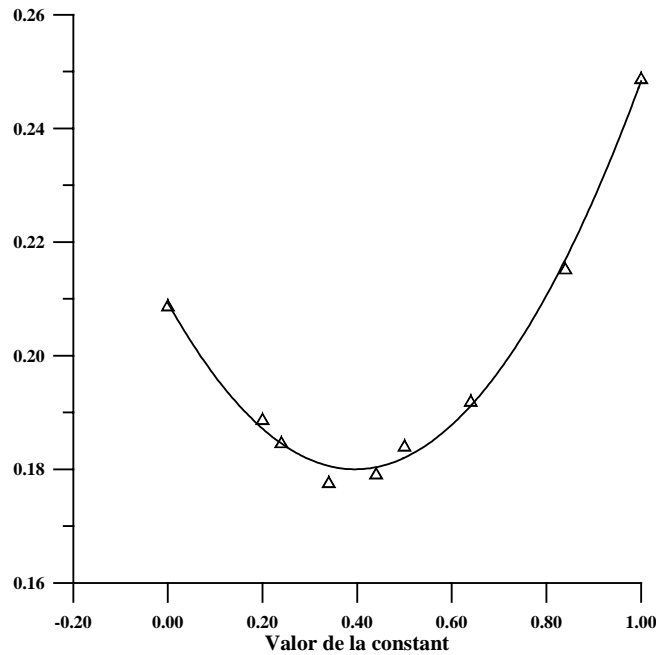


Figura 13.1

Optimització de la constant  $\lambda_B$  de backflow del sistema bidimensional normal

El paràmetre  $\Omega_B$  està lligat a l'amplada de la gaussiana. El seu valor s'ha fet variar entre  $0.40\sigma < \Omega_B < 1.44\sigma$ . S'han trobat dos mínims, un a  $\Omega_B = 0.95\sigma$  i l'altra en  $\Omega_B = 0.54\sigma$ , que és el valor òptim emprat en 3D. En l'anàlisi feta es comprova que aquest darrer és l'òptim, ja que mentre amb el valor primer s'obté una energia de  $0.140 \pm 0.001$  K, amb  $\Omega_B = 0.54\sigma$  l'energia és tant sols de  $0.132 \pm 0.001$  K.

El tercer paràmetre,  $S_B$ , dona la posició del pic, i torna a trobar-se clarament situat sobre el mateix valor del sistema de tres dimensions:  $S_B = 0.75\sigma$

## 13.2 Estudi en densitats

A la taula 13.1 es donen els resultats de l'energia per partícula en funció de la densitat per al sistema amb backflow i es comparen amb l'anterior càlcul sense backflow. La corba obtinguda és molt similar a la del capítol anterior, i està situada sempre per dessota d'ella.

| <i>Densitat</i><br>( $\sigma^2$ ) | <i>Energia del sistema sense</i><br><i>backflow (K)</i> | <i>Energia del sistema amb</i><br><i>backflow (K)</i> | <i>Diferència</i><br>(K) |
|-----------------------------------|---|---|--------------------------|
| 0.01                              | 0.0295±0.0010   | 0.0262±0.0004   | 0.0033                   |
| 0.04                              | 0.0760±0.0015   | 0.0747±0.0007   | 0.0013                   |
| 0.06                              | 0.0975±0.0015   | 0.0971±0.0026   | 0.0004                   |
| 0.08                              | 0.1209±0.0024   | 0.1026±0.0066   | 0.0183                   |
| 0.10                              | 0.1324±0.0028   | 0.1244±0.0018   | 0.0080                   |
| 0.12                              | 0.1527±0.0033   | 0.1466±0.0014   | 0.0061                   |
| 0.17                              | 0.2318±0.0046   | 0.2204±0.0022   | 0.0114                   |
| 0.21                              | 0.3527±0.0058   | 0.3198±0.0029   | 0.0329                   |
| 0.23                              | 0.4324±0.0113   | 0.3939±0.0022   | 0.0385                   |
| 0.30                              | 0.9048±0.0098   | 0.8369±0.0037   | 0.0679                   |

Taula 13.1

Energia del sistema bidimensional normal amb i sense backflow

El descens produït per la introducció de les correlacions de backflow creix conforme augmenta la densitat, com es pot veure a la figura 13.2.

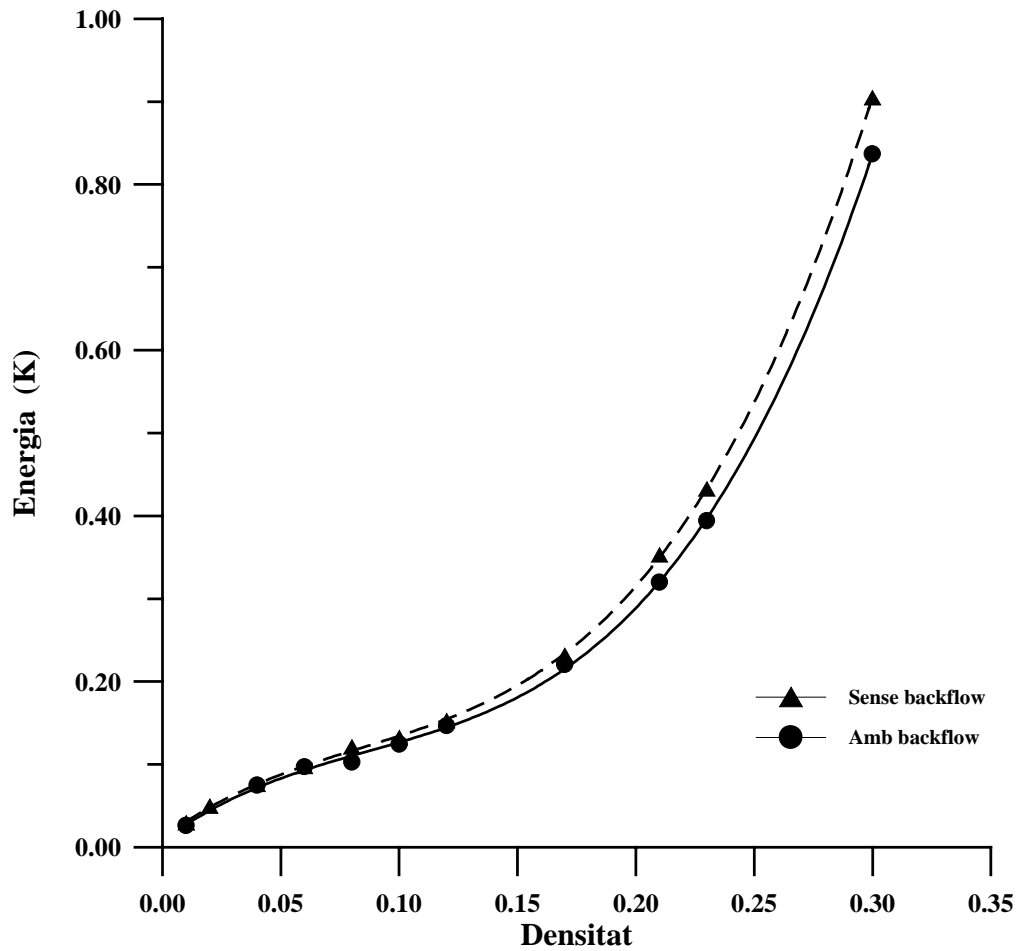


Figura 13.2

Energia (K) en funció de la densitat ( $\sigma^2$ ) del sistema bidimensional normal amb i sense backflow

Tot i que el descens produït per la introducció de les correlacions de backflow és més evident a altes densitats, si es calcula el descens relatiu a l'energia sense backflow s'obté un valor quasi constant.

A les figures 13.3 i 13.4 es representen respectivament, el descens absolut i relatiu en l'energia produït pel backflow.

A la figura 13.3 es veu que els seus efectes sobre l'energia no són lineals amb la densitat. S'hi ha ajustat un polinomi de tercer grau, fent més clar com, a partir d'una densitat de més o menys  $0,17\sigma^2$ , la seva influència creix més ràpidament. Ara bé, degut a que l'energia tampoc té un creixement lineal amb la densitat, quan es calcula la disminució relativa de l'energia que aporta el backflow s'obtenen uns valors que oscil·len al voltant d'un valor promig (figura 13.4). Els valors presenten fortes oscil·lacions, ocasionades pels errors estadístics, però tots ells es situen al voltant del 7%, insinuant potser un petit creixement amb la densitat. Tot i aquest petit augment sembla que els efectes relatius del backflow es mantenen pràcticament constants dins el rang de densitats estudiades.

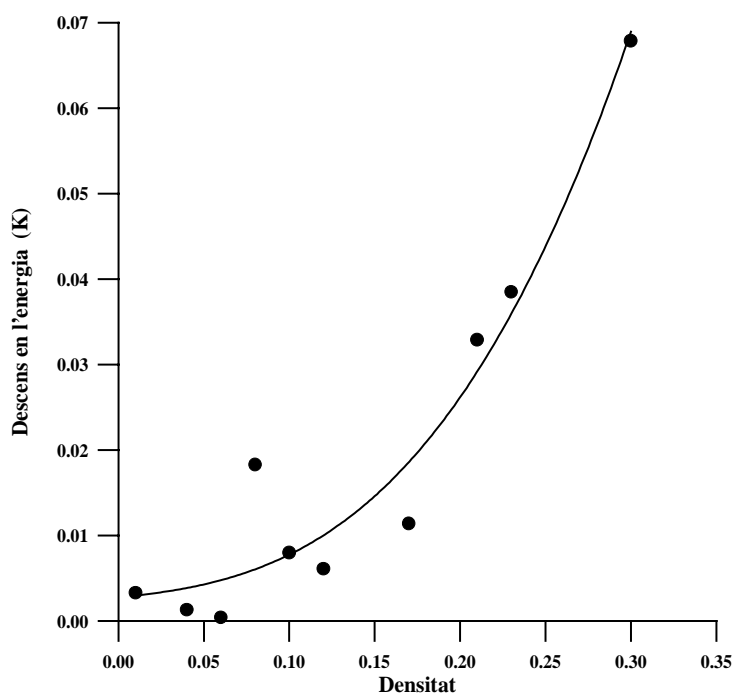


Figura 13.3

Descens absolut (K) en funció de la densitat ( $\sigma^2$ ) produït pel backflow sobre l'energia total

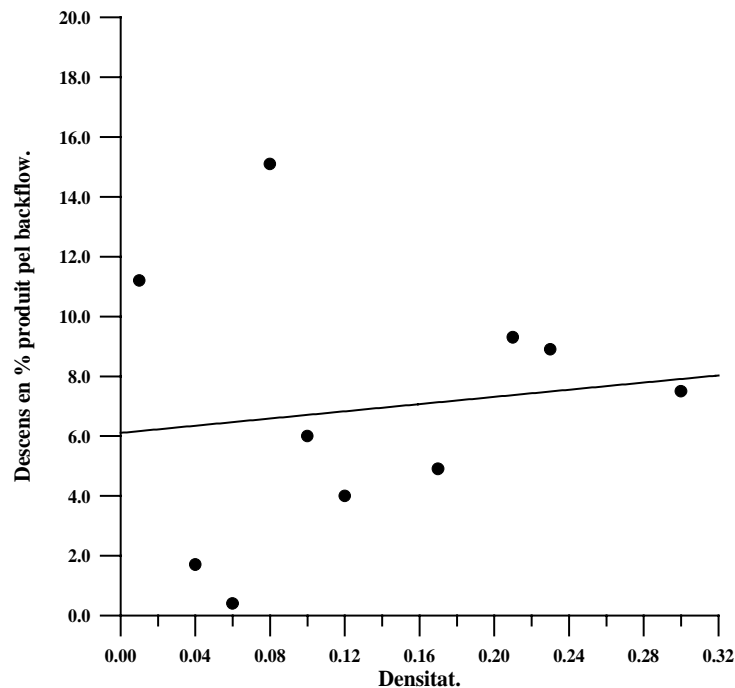


Figura 13.4

Descens relatiu en funció de la densitat ( $\sigma^{-2}$ ) produït pel backflow sobre l'energia total

Per tal de comprovar que els valors calculats per a l'energia són els correctes s'ha fet el càlcul amb el mètode de relaxació de nodes. Per confirmar les dades s'ha aplicat el mètode a una densitat mitjana:  $\rho = 0.10\sigma^{-2}$ , i a la densitat més alta:  $\rho = 0.30\sigma^{-2}$ .

En els dos casos s'ha obtingut el mateix resultat: una disminució lineal de l'energia per al sistema sense backflow, indicant que l'energia encara mostra una petita desviació respecte al valor exacte, i un pendent un ordre de magnitud menor quan s'hi afegeixen aquestes correlacions. Els resultats, que queden il·lustrats les figures 13.5 i 13.6, permeten assegurar que els valors obtinguts per a l'energia són efectivament molt propers als valors exactes, essent l'efecte residual degut a l'aproximació FN molt petit. Les línies corresponen a ajustos lineals sobre els valors calculats.

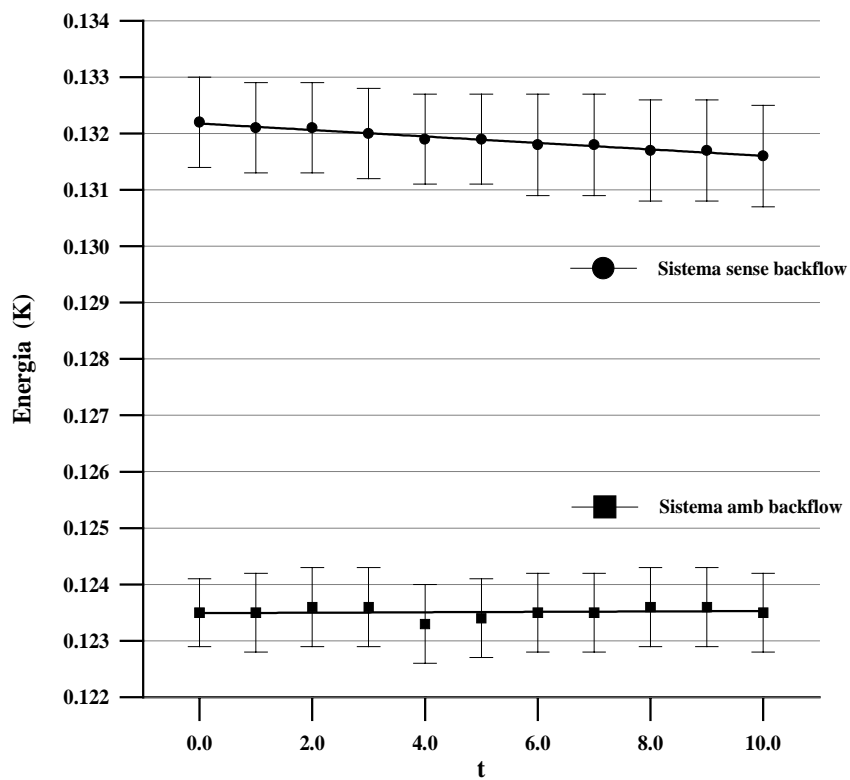


Figura 13.5

Càlcul RN sobre el sistema bidimensional normal amb i sense backflow a la densitat  $0.10\sigma^{-2}$ .

Pendent sense backflow:  $-6 \cdot 10^{-5} \pm 3 \cdot 10^{-6}$

Pendent amb backflow:  $3 \cdot 10^{-6} \pm 4 \cdot 10^{-6}$

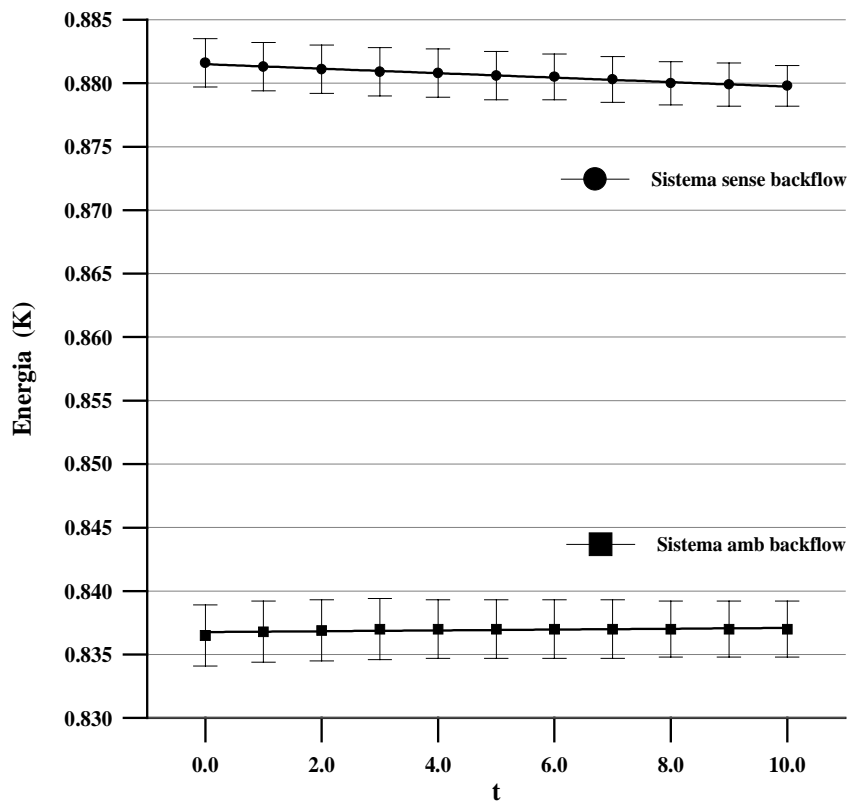


Figura 13.6

Càlcul RN sobre el sistema bidimensional normal  
amb i sense backflow a la densitat  $0.30\sigma^{-2}$ .

Pendent sense backflow:  $-2 \cdot 10^{-4} \pm 1 \cdot 10^{-5}$

Pendent amb backflow:  $3 \cdot 10^{-5} \pm 1 \cdot 10^{-5}$



### 13.3 Càlcul aproximat de la massa efectiva

Una manera aproximada d'obtenir la massa efectiva de l' $^3\text{He}$  és afegir sobre el càlcul del sistema bosònic un terme d'energia que contingui la massa efectiva  $m^*$  necessària per a obtenir el valor exacte de l'energia del sistema fermiònic. Es tracta sens dubte d'un model aproximat sense cap base ferma, però permet accedir fàcilment a una estima de  $m^*$  que d'altra manera resulta difícil de calcular. Un càlcul ben fet i millor justificat de la massa efectiva inclou el càlcul d'energies d'estats excitats. Un estudi en aquesta línia va ser fet per Kwon, Ceperley i Martin [KCM94] sobre un gas bidimensional d'electrons.

La massa efectiva  $m^*$  i la massa real  $m$  de l' $^3\text{He}$  es relacionen a través de l'energia de Fermi del sistema lliure. D'acord amb aquest esquema es pot escriure:

$$\left. \begin{aligned} E_{\text{fermiònic}} - E_{\text{bosònic}} &= \frac{\hbar^2}{2m^*} \pi \rho \\ E_{\text{Fermi}} &= \frac{\hbar^2}{2m} \pi \rho \end{aligned} \right\} \quad (13.1)$$

d'on es dedueix la relació:

$$\frac{m^*}{m} = \frac{E_{\text{Fermi}}}{E_{\text{fermiònic}} - E_{\text{bosònic}}} \quad (13.2)$$

Amb ella pot trobar-se el valor de la massa efectiva per al nostre sistema. En ser aquest un sistema totalment teòric, no hi ha possibilitat de contrastar aquests valors amb mesures. Ara bé, si que poden comparar-se amb les mesures fetes en capes d' $^3\text{He}$  sobre un substrat, i veure si els resultats són compatibles. Els resultats obtinguts tot i ser sobre sistemes diferents, estan dins un mateix ordre de magnitud, i en resulten uns valors molt similars als experimentals. Les comparacions s'han fet sobre el sistema amb backflow, ja que així s'obtenen els millors resultats per a l'energia. L'efecte d'aquestes correlacions sobre la massa efectiva també s'analitza al final de l'apartat.

Les comparacions han estat fetes amb les dades subministrades per quatre fonts, dues d'elles referides a valors de la massa efectiva obtingudes d'una primera capa d' $^3\text{He}$  i les altres dues corresponents a la segona capa. Totes elles són mesures d'heli adsorbit en

un substrat de grafit, i sempre són resultats indirectes a partir de les mesures fetes sobre la capacitat calorífica del sistema.

El càlcul més antic amb que es compara és amb [McLean72], són càlculs de la massa efectiva fets l'any 1972 per McLean a partir de mesures de la capacitat calorífica, i corresponen a la primera capa d' $^3\text{He}$ . Aquestes dades són molt properes a les donades a [G90] tot i que les donades per Greywall corresponen a la segona capa d' $^3\text{He}$ .

Dades més recents amb que es poden comparar els resultats són les subministrades a [MBG95] i [MBBBFG96]. La primera referència correspon a dades obtingudes d'una primera capa d' $^3\text{He}$  sobre Grafoil (capes de grafit subministrades per Union Carbide). Del mateix grup de treball són les dades de la segona referència, que estudia la segona capa d' $^3\text{He}$ .

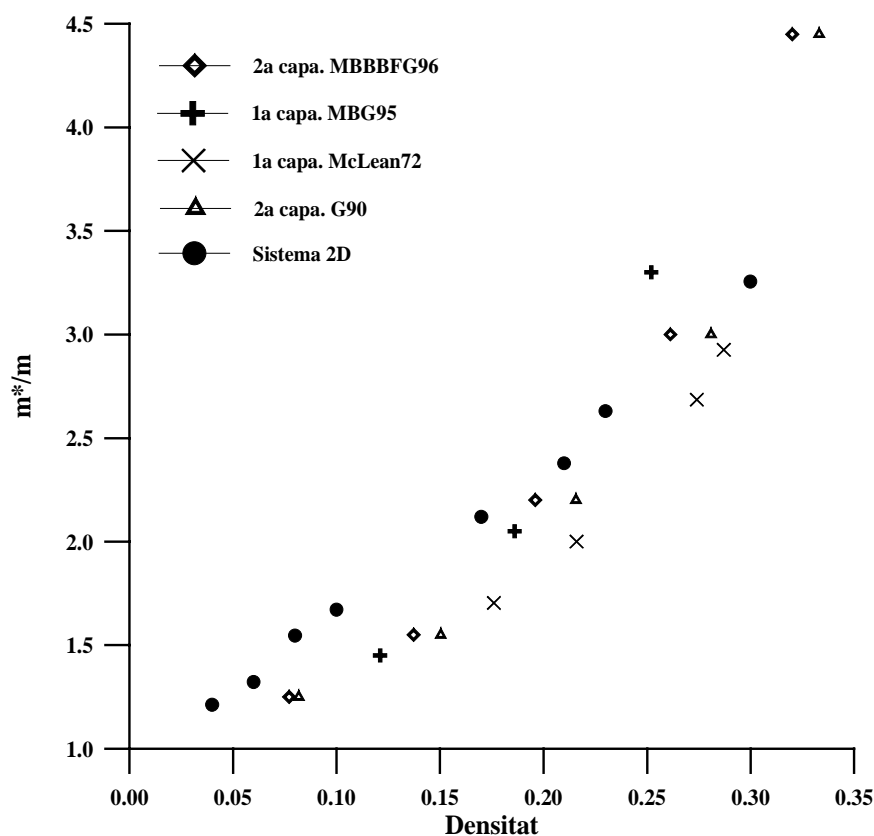


Figura 13.6

Massa efectiva en funció de la densitat ( $\sigma^2$ ) de l' $^3\text{He}$  normal bidimensional

A la figura 13.6 es comparen aquests resultats, que com es pot veure prenen tots ells uns valors similars. Les dades corresponents al present estudi són les etiquetades com a sistema 2D.

Hi ha una raó important per usar el grafit com a substrat en les experiències, i és que, a diferència d'altres materials, sembla no tenir efectes qualitius sobre la capa adsorbida, de manera que les propietats dels fluids quàntics adsorbits pràcticament no es veuen afectades. Això fa del grafit un dels substrats més emprats per a la mesura de les característiques de l' $^3\text{He}$  bidimensional. Se'n pot veure un bon estudi d'aquests efectes a [NC75]. En aquest article Novaco i Campbell valoren com a quasi negligibles els efectes introduïts pel substrat de grafit, i consideren els seus resultats experimentals comparables als que s'obtidrien amb una capa perfectament bidimensional. També tracta de l'efecte del substrat de grafit sobre les capes d'heli l'estudi de l'any 1974 de Siddon i Schick [SS74A][SS74B].

Quant al fet que es tracti de mesures sobre la primera o segona capa d' $^3\text{He}$ , això no sembla influir significativament en els resultats per a la massa efectiva. Aquest fet quedaria reforçat pel petit efecte que, com abans es comentava, té el substrat de grafit sobre les propietats quàntiques de la capa d' $^3\text{He}$ . Els treballs referenciats: [BDHMV73], [Gr90], [LCS91] i [MBG95] mostren que sobre aquest substrat, la primera i segona capa d' $^3\text{He}$  es comporten com líquids de Fermi bidimensionals.

### **Influència del backflow sobre la massa efectiva.**

Com es pot veure a la següent taula de valors, el backflow té com a conseqüència augmentar la massa efectiva de l' $^3\text{He}$ . Amb la precisió obtinguda en aquest càlcul, únicament es pot veure un increment progressiu d'aquesta diferència en augmentar la densitat.

| Densitat<br>( $\sigma^2$ ) | $m^*/m$<br>amb backflow | $m^*/m$<br>sense backflow | Diferència |
|----------------------------|-------------------------|---------------------------|------------|
| 0.04                       | 1.2114                  | 1.1992                    | 0.0122     |
| 0.06                       | 1.3212                  | 1.3182                    | 0.0030     |
| 0.08                       | 1.5450                  | 1.4156                    | 0.1294     |
| 0.10                       | 1.6707                  | 1.6149                    | 0.0558     |
| 0.17                       | 2.1183                  | 2.0432                    | 0.0751     |
| 0.21                       | 2.3777                  | 2.1688                    | 0.2089     |
| 0.23                       | 2.6295                  | 2.3608                    | 0.2687     |
| 0.30                       | 3.2547                  | 2.7338                    | 0.5209     |

Taula 13.2

Efecte de la inclusió del backflow en la massa efectiva del sistema bidimensional normal

### 13.4 Anàlisi d'algunes propietats del sistema: pressió, velocitat del so i compressibilitat

El coneixement dels valors de l'energia en funció de la densitat permet obtenir algunes propietats del sistema. Amb una primera derivada de l'energia s'obté la pressió ( $P$ ) del sistema. La derivada de  $P$  dona informació sobre la compressibilitat ( $\kappa$ ) i la velocitat del so ( $c$ ) en funció de la densitat. Les relacions són les següents:

$$P = \rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{E}{N} \right) \quad c^2 = \frac{1}{m} \frac{\partial P}{\partial \rho} \quad \frac{1}{\kappa} = \rho \frac{\partial P}{\partial \rho} \quad (13.3)$$

Efectuant un ajust polinòmic s'obté un bon acord amb un polinomi de grau 3:

$$\frac{E}{N} = 0.0758924 + 2.11548\rho - 14.9564\rho^2 + 57.0376\rho^3 \quad (13.4)$$

(on com sempre la densitat s'expressa en  $\sigma^2$  i l'energia en K) que dona lloc a les següents equacions:

$$P = \rho^2(2.11548 - 29.9128\rho + 171.1128\rho^2) \quad (13.5)$$

$$\kappa = \frac{1}{\rho^2(4.23096 - 89.7384\rho + 684.4512\rho^2)} \quad (13.6)$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{m}} \sqrt{\rho(4.23096 - 89.7384\rho + 684.4512\rho^2)} \quad (13.7)$$

corresponents a les figures 13.7, 13.8 i 13.9.

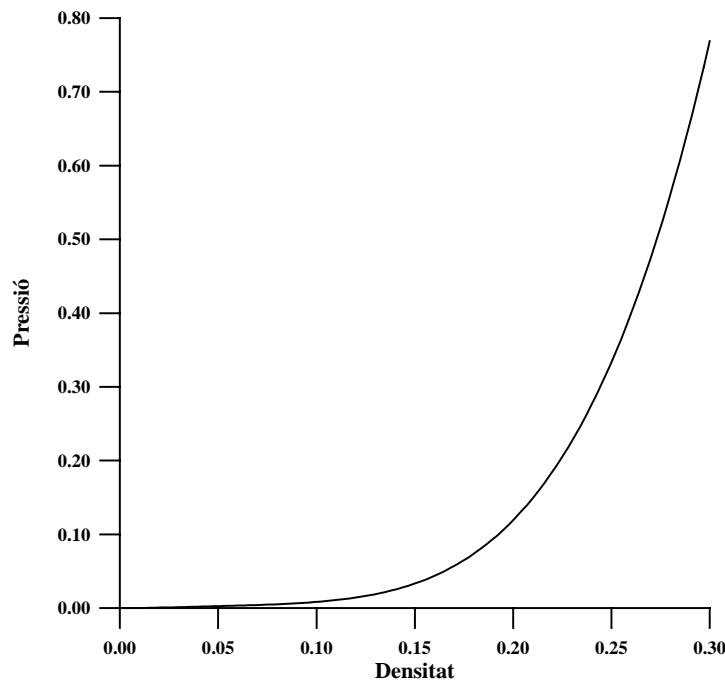


Figura 13.7

Pressió ( $K\sigma^2$ ) en funció de la densitat ( $\sigma^2$ ) del sistema bidimensional normal amb backflow

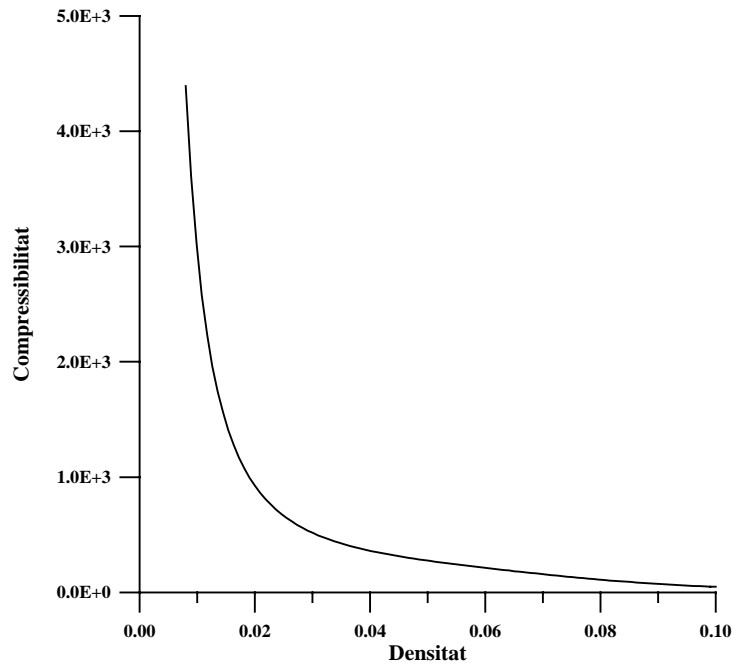


Figura 13.8

Compresibilitat ( $K^{-1}\sigma^2$ ) en funció de la densitat ( $\sigma^2$ ) del sistema bidimensional normal amb backflow

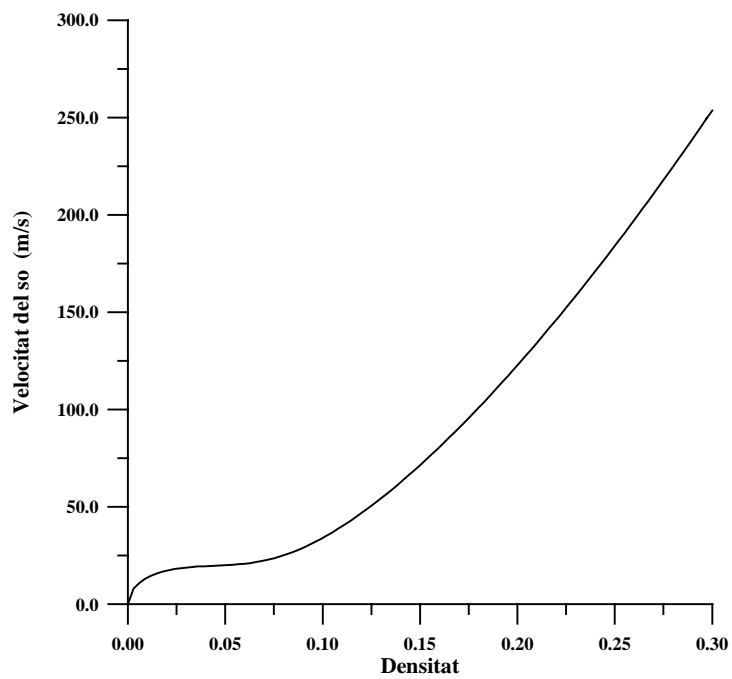


Figura 13.9

Velocitat del so (m/s) en l'heli normal en funció de la densitat ( $\sigma^2$ )

### 13.5. La funció de distribució radial a dos cossos $g(r)$

Les funcions de distribució emprades en l'estudi dels líquids expressen la densitat de probabilitat de trobar un cert nombre  $n$  de partícules en les posicions  $r_1, \dots, r_n$  dins d'un conjunt de  $N$  partícules. Aquesta distribució a  $n$  cossos s'escriu:

$$P^{(n)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \frac{N!}{(N-n)!} \frac{\int d\vec{r}_{n+1} \dots d\vec{r}_N |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2}{\int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2} \quad (13.8)$$

A partir d'ella es defineix, per a  $n=2$ , la funció de distribució radial a dos cossos:

$$g(r_{12}) = \frac{N(N-1)}{\rho^2} \frac{\int d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2}{\int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2} \quad (13.9)$$

I pot demostrar-se que en el cas de sistemes de Fermi infinits i sense interaccions en l'estat base, aquesta funció pot escriure's [Ros81]:

$$g_{lliure}(r_{12}) = 1 - \frac{1}{v} l_{2D}^2(k_F r_{12}) \quad (13.10)$$

Per analogia amb el sistema 3D s'ha definit la funció  $l_{2D}$ :

$$l_{2D}(k_F r_{12}) = \frac{v}{(2\pi)^2 \rho} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}_{12}} \quad (13.11)$$

amb la integral estesa des de zero fins al moment de fermi. El càlcul detallat d'aquestes quantitats és fet a l'apèndix G, on es dedueix el resultat:

$$g_{lliure}(r) = 1 - \frac{v}{4\pi^2 \rho^2} \frac{k_F^2}{r^2} (J_1(rk_F))^2 \quad (13.12)$$

En comparar els resultats obtinguts per a les funcions  $g(r)$  a diferents densitats, es veu clarament com, en augmentar la densitat, va apareixent més estructura en el sistema, que es posa de manifest per l'aparició d'una sèrie de pics que creixen en alçada. Aquests pics són deguts a la major localització de les partícules a determinades distàncies. Així mateix, com que en augmentar la densitat disminueix la distància interatòmica, la posició

del màxim de  $g(r)$  es desplaça cap a  $r$  menors. Aquests dos efectes s'observen en la figura 13.10.

Per a dos valors diferents de la densitat es representa la funció  $g$  total i també descomposta en les corresponents a  $g_{\uparrow\uparrow}$  i  $g_{\uparrow\downarrow}$ . A efectes de comparació s'hi representen també les funcions  $g_{\uparrow\uparrow}$  i  $g_{\uparrow\downarrow}$  del sistema lliure, que són les funcions:

$$g_{\uparrow\uparrow}^{\text{lliure}}(r) = 1 - \frac{2}{\pi\rho} \frac{(J_1(rk_F))^2}{r^2} \quad (13.13)$$

$$g_{\uparrow\downarrow}^{\text{lliure}}(r) = 1 \quad (13.14)$$

Les figures 13.11 i 13.12 corresponen a una densitat baixa i a una altra d'alta. En el primer d'ells es veu com per a baixa densitat la funció  $g_{\uparrow\uparrow}^{\text{lliure}}$  del sistema lliure s'aproxima molt a la corba  $g_{\uparrow\uparrow}$  real obtinguda del càlcul. La gran similitud que s'aprecia entre les dues corbes és deguda a que a tan baixa densitat les correlacions dinàmiques hi juguen un paper molt petit, i fan que el sistema sigui molt similar al lliure, en que l'estadística fermiònica passa a ser la interacció rellevant.

L'efecte de les correlacions de backflow sobre aquestes funcions és molt petit, i no s'ha representat perquè sobre el gràfic és inapreciable.



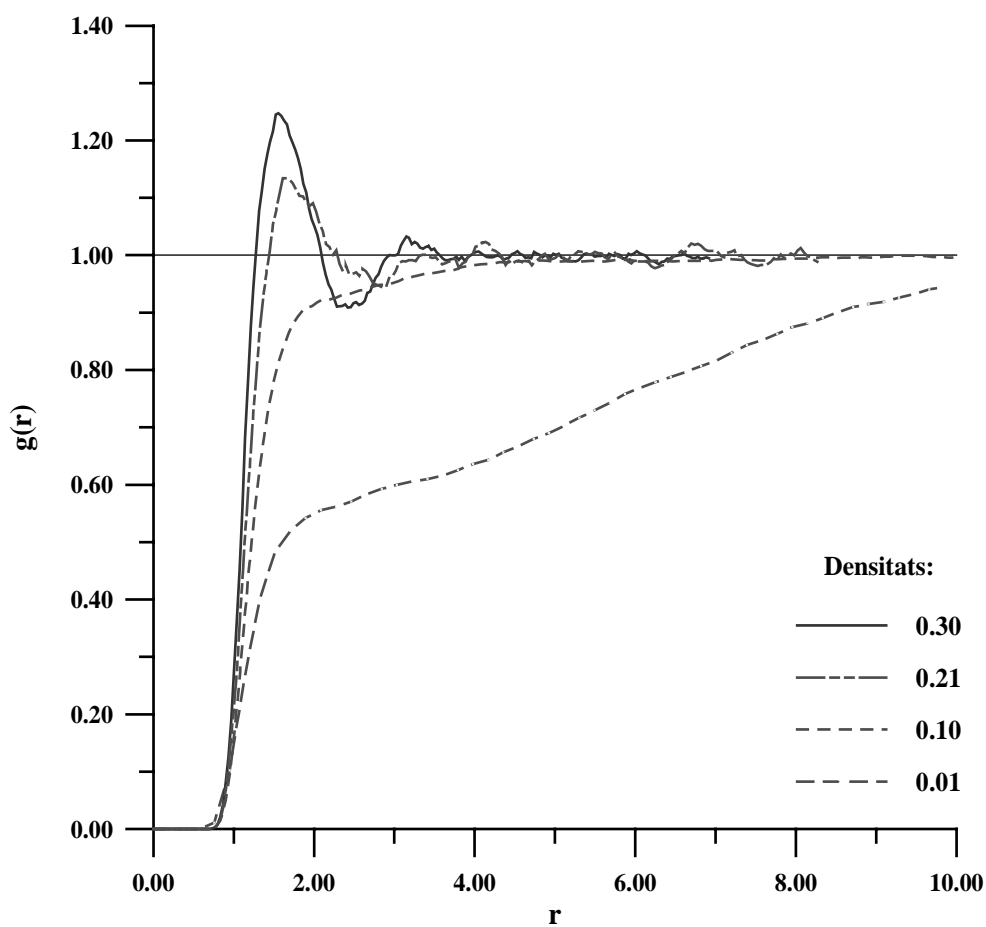
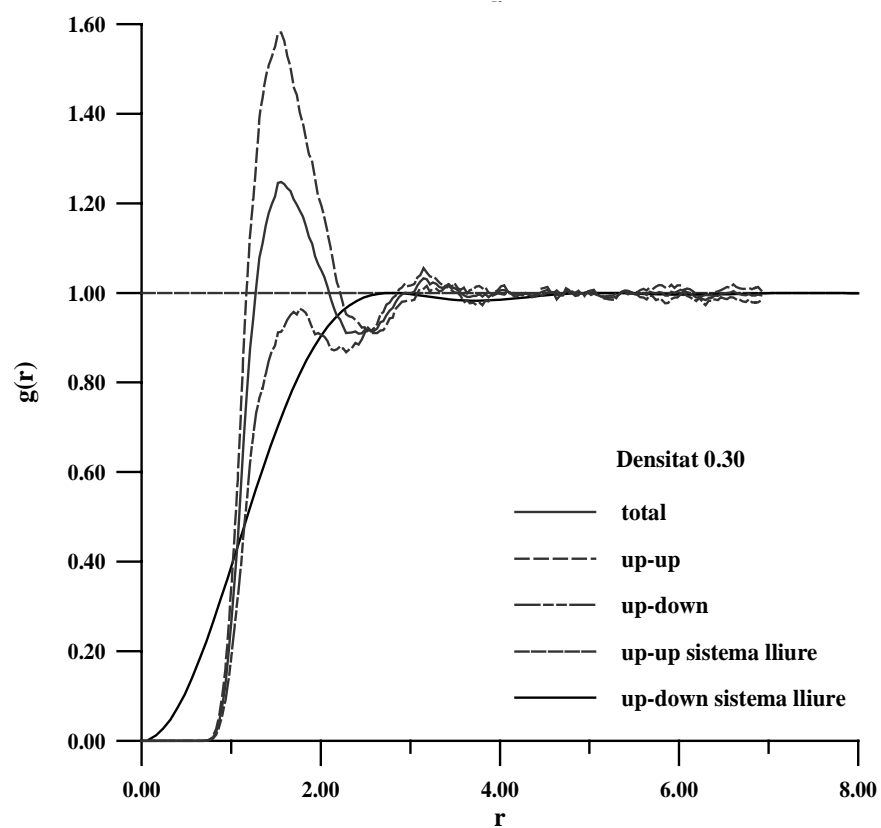
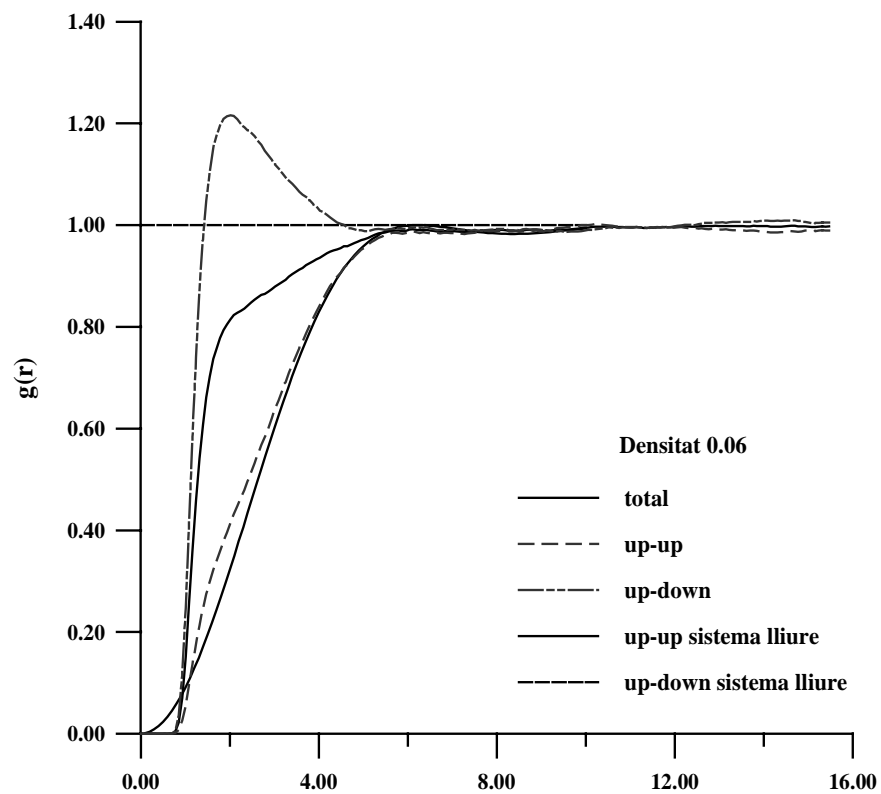


Figura 13.10

Corbes corresponents a l'estimador pur de la funció  $g(r)$  total per a diferents valors de la densitat. La distància s'expressa en  $\sigma$  i la densitat en  $\sigma^{-2}$ .

Pàgina següent (figures 13.11 i 13.12): estimadors purs de la funció  $g(r)$  a baixa i alta densitat. Es comparen amb les funcions calculades del sistema sense interacció



Figures 13.11 i 13.12

### 13.6 Estudi de la dependència en densitat de la constant de backflow

El valor de la constant de backflow que s'ha pres com a òptim,  $\lambda_B = 0.40$ , ha estat calculat a la densitat  $\rho = 0.1\sigma^{-2}$ . Per a veure si hi ha alguna dependència en densitat d'aquest valor s'ha tornat a optimitzar per a la densitat més alta:  $\rho = 0.30\sigma^{-2}$ . Tot i que els resultats semblen indicar una tendència a reduir el valor òptim, un estudi exhaustiu del rang de valors  $\lambda_B \in [0.25, 0.35]$  mostra que les energies obtingudes no milloren respecte al valor aconseguit amb  $\lambda_B = 0.40$ .

Així doncs, tot i que no pot descartar-se una petita influència de la densitat sobre el valor de la constant de backflow, si hi és, els efectes d'aquesta variació sobre l'energia per partícula són de l'ordre dels errors dels resultats.