

15. Estudi de $L^3\text{He}$ bidimensional totalment polaritzat

15.1 Tria i optimització de paràmetres

D'entre els diversos paràmetres que cal establir abans d'engegar els càlculs, el primer de tots ells és el nombre de partícules amb que s'omplirà la caixa de simulació. S'intenta mantenir el criteri d'aconseguir un equilibri entre l'ús d'un número prou alt de partícules, mantenir les capes plenes i evitar una durada excessiva dels càlculs. Per al sistema completament polaritzat això s'ha aconseguit fent:

$$N_{\uparrow} = 61 \text{ i } N_{\downarrow} = 0 \quad (15.1)$$

L'altre paràmetre important és el valor de la constant b de la funció de Jastrow. L'optimització d'aquest paràmetre ha donat un valor tres centèsimes inferior respecte al valor òptim corresponent al sistema normal, quedant fixat en

$$b = 1.13\sigma \quad (15.2)$$

15.2 L'energia de Fermi en el sistema bidimensional polaritzat

De la mateixa manera que en el sistema normal (apartat 12.1), es pot calcular l'energia de Fermi del sistema lliure infinit totalment polaritzat per a cada densitat. La única diferència amb aquell és que ara la degeneració deguda al spin és 1. Això representa un factor 2 de diferència entre els resultats respectius. Les fórmules obtingudes, que aquí es comparen les del sistema normal, són:

moment de Fermi

$$\begin{aligned}\Delta = 0 &\Rightarrow k_F = \sqrt{2\pi\rho} \\ \Delta = 1 &\Rightarrow k_F = \sqrt{4\pi\rho}\end{aligned}\tag{15.3}$$

energia de Fermi

$$\frac{E_F}{N} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 \right) \begin{cases} \Delta = 0 & \frac{E_F}{N} = \frac{\hbar^2}{2m} \pi\rho \\ \Delta = 1 & \frac{E_F}{N} = \frac{\hbar^2}{m} \pi\rho \end{cases}\tag{15.4}$$

És a dir, que en el sistema bidimensional infinit totalment polaritzat l'energia de Fermi és el doble de la del corresponent sistema normal a la mateixa densitat:

$$\left(\frac{E_F}{N} \right)_{\Delta=1} = 2 \cdot \left(\frac{E_F}{N} \right)_{\Delta=0}\tag{15.5}$$

Ara bé, quan es determina la diferència d'energia entre el sistema infinit i l'utilitzat per al càlcul, amb 61 partícules, aquesta resulta ser de 20 a 30 vegades inferior a la del sistema normal.

15.3 Estudi en densitats del sistema polaritzat sense backflow

$L^3\text{He}$ bidimensional completament polaritzat és, com en el cas tridimensional, un estat menys favorable energèticament que $l^3\text{He}$ normal. En el sistema tridimensional és necessari incloure les interaccions de backflow al sistema normal per tal que aquest es situï a energies inferiors a les del sistema polaritzat. En canvi, en el sistema bidimensional això no passa, i l'energia del sistema normal, fins i tot sense backflow, es situa sempre a valors per dessota els del sistema polaritzat.

A continuació es tabulen els resultats de l'energia en el sistema polaritzat sense backflow, mostrant clarament aquest comportament.

<i>Densitat (σ^2)</i>	<i>E/N (K) $\Delta=0$ sense backflow</i>	<i>E/N (K) $\Delta=0$ amb backflow</i>	<i>E/N (K) $\Delta=1$ sense backflow</i>
0.01	0.0295±0.0010	0.0262±0.0004	0.0652±0.0005
0.04	0.0760±0.0015	0.0747±0.0007	0.1808±0.0013
0.06	0.0975±0.0015	0.0971±0.0026	0.2244±0.0030
0.10	0.1324±0.0028	0.1244±0.0018	0.2768±0.0034
0.17	0.2318±0.0046	0.2204±0.0022	0.3466±0.0023
0.21	0.3527±0.0058	0.3198±0.0029	0.4259±0.0036
0.23	0.4324±0.0113	0.3939±0.0022	0.4894±0.0024
0.30	0.9048±0.0098	0.8369±0.0037	0.8990±0.0041

Taula 15.1

Resultats per a l'energia del sistema completament polaritzat sense backflow. Es comparen amb els resultats del sistema normal obtinguts al capítol 12.

Com es veu a la taula 15.1 les diferències entre les energies dels sistemes normal i polaritzat van disminuint a mesura que augmenta la densitat. A la densitat $\rho = 0.30\sigma^{-2}$ la diferència es fa compatible amb zero, tenint en compte els respectius errors estadístics.

15.4 Introducció de les correlacions de backflow en el sistema polaritzat

En introduir de les correlacions de backflow al sistema completament polaritzat es fa necessari optimitzar de nou la constant de backflow. De la mateixa manera que en el sistema tridimensional, en augmentar la polarització la constant de backflow λ_B pren un valor més petit. En aquest cas la reducció en el valor òptim de la constant és notable, passant dels $\lambda_B = 0.40$ del sistema normal a $\lambda_B = 0.10$ per al polaritzat. Els altres dos paràmetres inclosos en la interacció de backflow no mostren cap canvi significatiu en la seva optimització, i per tant seran els mateixos que els emprats fins ara.

Així doncs el sistema polaritzat queda definit amb els següents paràmetres:

$$\begin{aligned} b &= 1.13 \\ \lambda_B &= 0.10 \quad \Omega_B = 0.54 \quad S_B = 0.74 \end{aligned} \quad (15.6)$$

L'efecte que té sobre l'energia la inclusió del backflow és una petita reducció en el seu valor. A continuació es tabulen ambdós resultats:

<i>Densitat (σ^2)</i>	<i>E/N (K) $\Delta=1$ sense backflow</i>	<i>E/N (K) $\Delta=1$ amb backflow</i>
0.01	0.0652±0.0005	0.0653±0.0004
0.04	0.1808±0.0013	0.1830±0.0015
0.06	0.2244±0.0030	0.2213±0.0016
0.10	0.2768±0.0034	0.2724±0.0019
0.17	0.3466±0.0023	0.3440±0.0017
0.21	0.4259±0.0036	0.4255±0.0016
0.23	0.4894±0.0024	0.4860±0.0013
0.30	0.8990±0.0041	0.8917±0.0022

Taula 15.2

Resultats per a l'energia del sistema completament polaritzat amb i sense backflow

És destacable de la taula anterior la petitesa de l'efecte del backflow sobre l'energia del sistema polaritzat, molt inferior al descens que ocasiona sobre el sistema normal. Mentre que en el sistema normal el descens produït és de l'ordre del 7% en aquest cas el descens oscil·la entre el 0.8% i l'1.6%. En el valor d'aquest descens tan petit no s'ha pogut observar cap dels comportaments il·lustrats en les figures 13.3 i 13.4 referides a la influència del backflow sobre el sistema normal. Possiblement és degut a que el seu valor és del mateix ordre que l'error estadístic.

La raó d'aquesta gran diferència en els efectes del backflow sobre els sistemes normal i polaritzat pot trobar-se en l'argument donat per Pandharipande i Bethe l'any 1973 [PB73]. Quan el sistema és completament polaritzat la funció d'ona relativa de dues partícules no té ona s perquè és simètrica d'spin. Com que l'efecte del backflow és més important en el canal s que en el canal p, el paper del backflow en el sistema polaritzat és menor.

A la figura 15.1 s'hi representen les energies obtingudes per al sistema totalment polaritzat amb backflow. La corba n'és l'ajust polinòmic als punts calculats:

$$\frac{E}{N} = 0.0245176 + 4.87975\rho - 31.8939\rho^2 + 84.2447\rho^3 \quad (\text{K}) \quad (15.7)$$

No s'hi representa el sistema sense backflow perquè les diferències són tan petites que sobre el gràfic les corbes es superposen.

L'estimador pur per a l'energia potencial també ha estat calculat, i amb ell l'energia cinètica pura, obtinguda com la diferència E-V. La representació de la figura 15.2 permet veure la forta compensació que es produeix entre els dos termes.

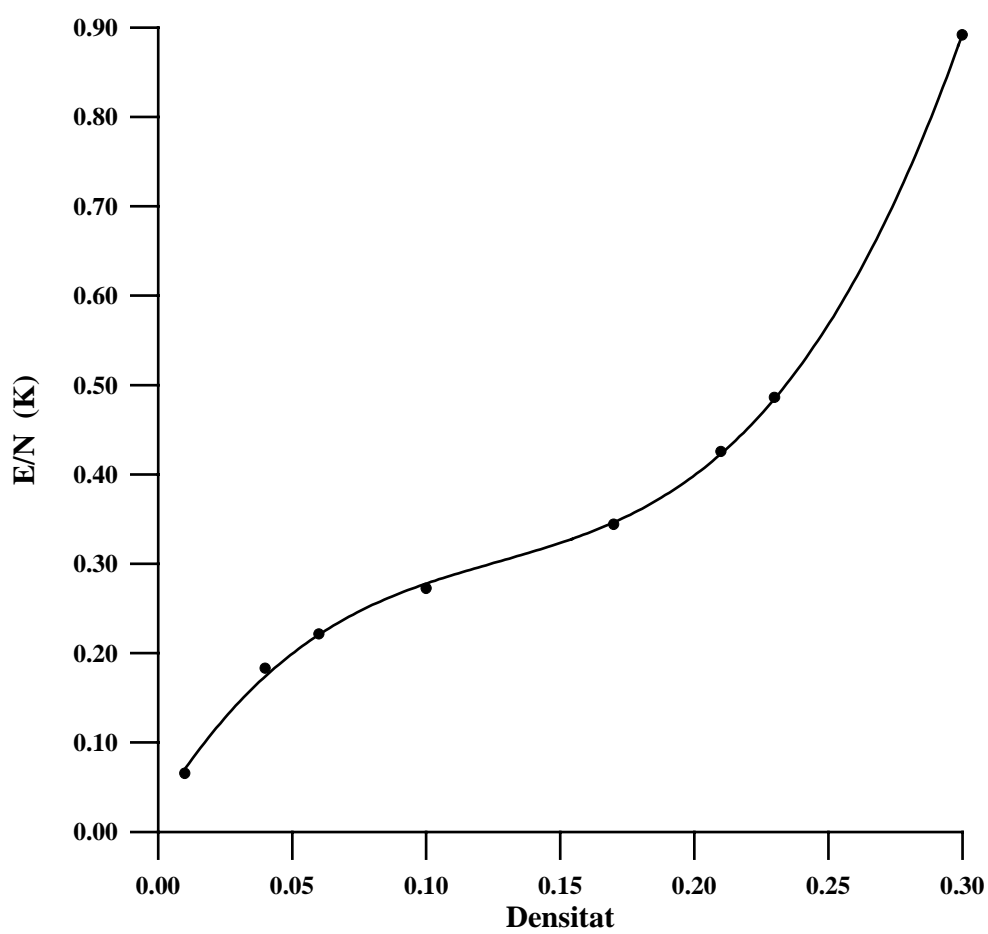


Figura 15.1

Energia (K) en funció de la densitat (σ^{-2}) per al sistema polaritzat amb backflow.

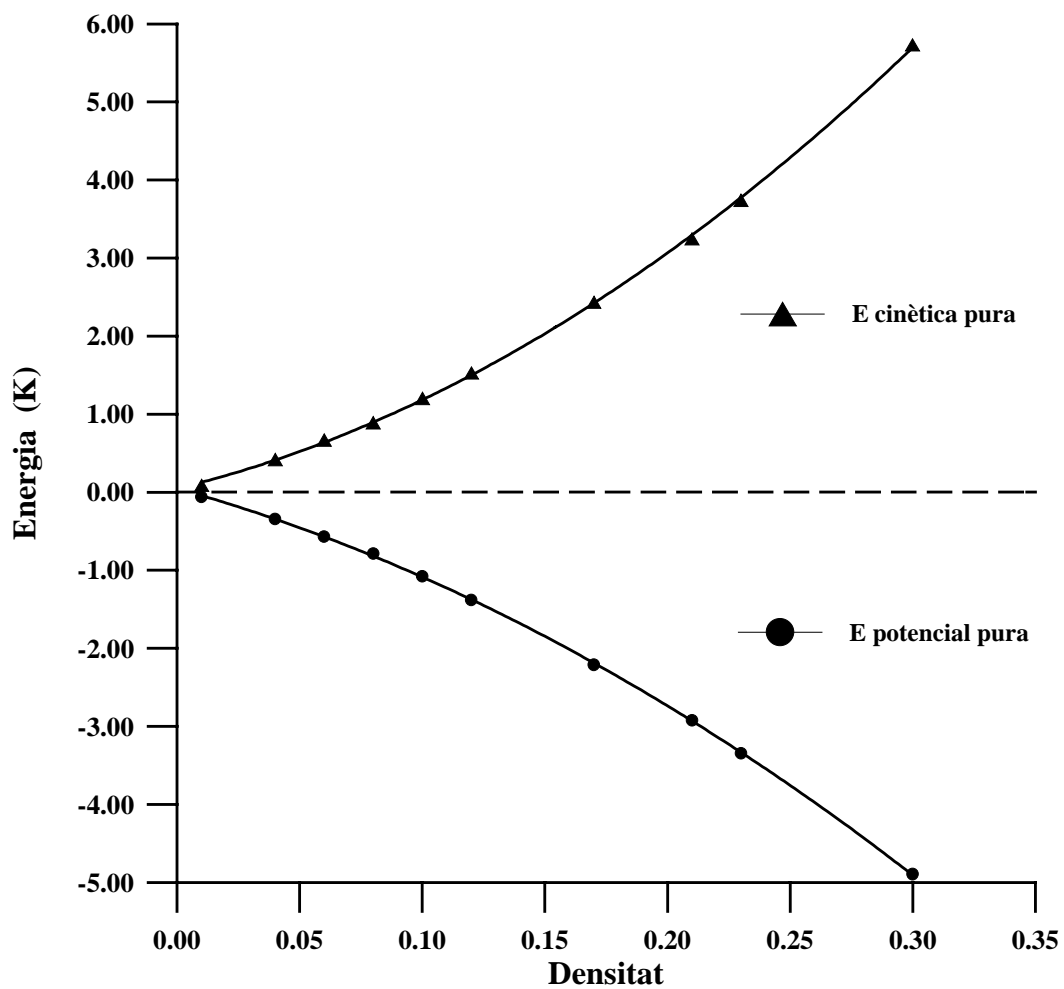


Figura 15.2

Estimadors purs de les energies cinètica i potencial (K) en funció de la densitat (σ^{-2}) del sistema bidimensional totalment polaritzat

15.5 Comparació entre els sistemes normal i polaritzat

Considerem els sistemes normal i polaritzat amb backflow. Si es comparen les figures corresponents a l'energia en funció de la densitat (figures 13.2 i 15.1 respectivament) es veu que s'obtenen dues corbes d'aspecte molt similar: ambdues tendeixen a zero per a baixes densitats, presenten un gran creixement a altes densitats, i mostren un canvi de concavitat situat a l'entorn de $\rho = 0.10\sigma^{-2}$ per al sistema normal, i de $\rho = 0.12\sigma^{-2}$ per al sistema polaritzat.

La diferència entre les energies d'ambdós sistemes va augmentant progressivament fins arribar a un màxim de $0.15K$ a la densitat $\rho = 0.12\sigma^{-2}$, i reduint-se després altre cop. Si es representa aquesta diferència s'obté la figura 15.3. A la figura 15.4 es pot comparar les energies i veure com afecta la polarització a l'energia de $l^3\text{He}$ normal. Així per exemple, a la densitat de $\rho = 0.10\sigma^{-2}$:

$$\left(\frac{E}{N}\right)_{\Delta=1} \cong 2 \cdot \left(\frac{E}{N}\right)_{\Delta=0} \quad (15.8)$$

El fort efecte de la polarització indica que en aquest rang de densitats intermitges les correlacions estadístiques induïdes pel principi de Pauli hi juguen un paper molt important, i com s'ha vist a l'apartat 15.2, l'energia de Fermi del sistema polaritzat és el doble de la del sistema normal. En augmentar la densitat, el pes relatiu d'aquestes correlacions disminueix enfront les correlacions dinàmiques, conseqüència de la reducció en les distàncies interatòmiques. Com que les correlacions dinàmiques tenen la mateixa importància en ambdós sistemes es redueix considerablement la diferència d'energia per polarització. En el límit de baixes densitats les energies s'apropen a zero.

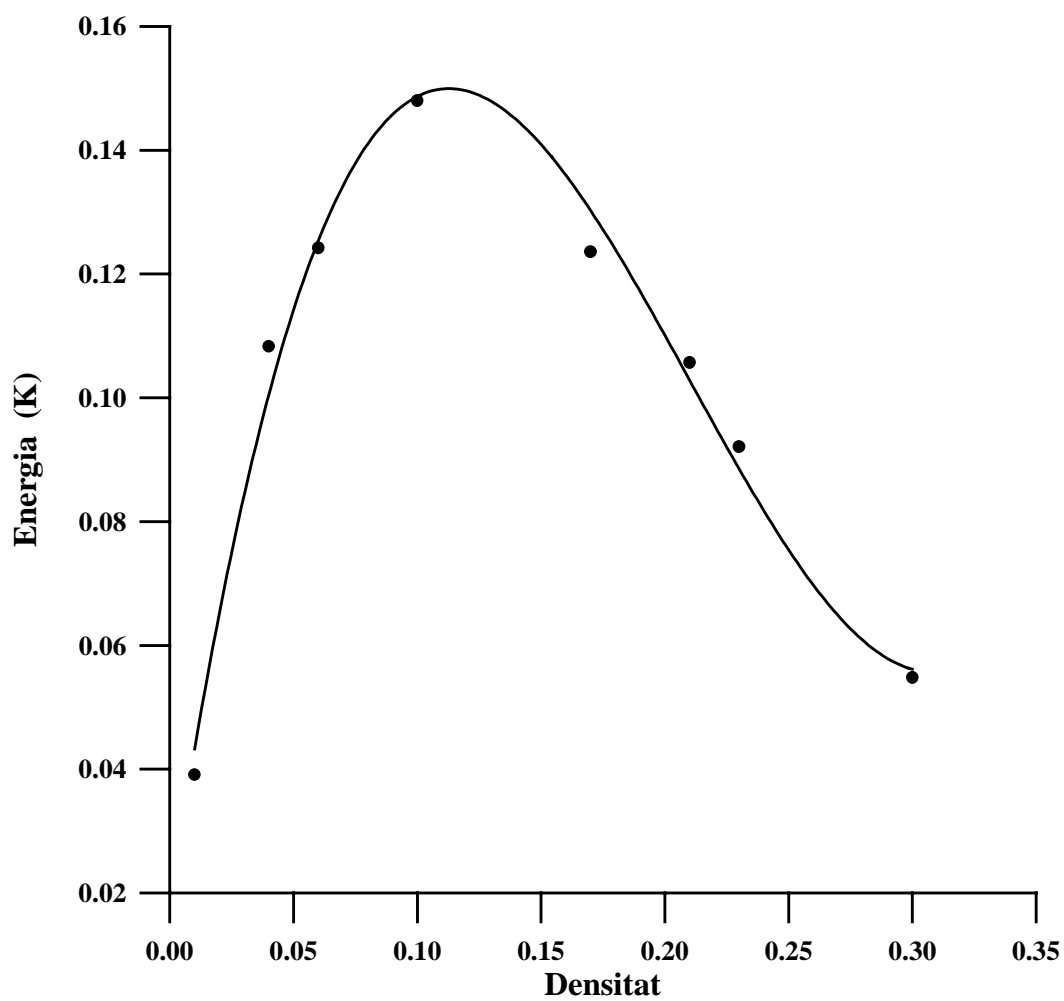


Figura 15.3

Diferència d'energies (K) entre els sistemes polaritzat i normal amb backflow en funció de la densitat (σ^2)

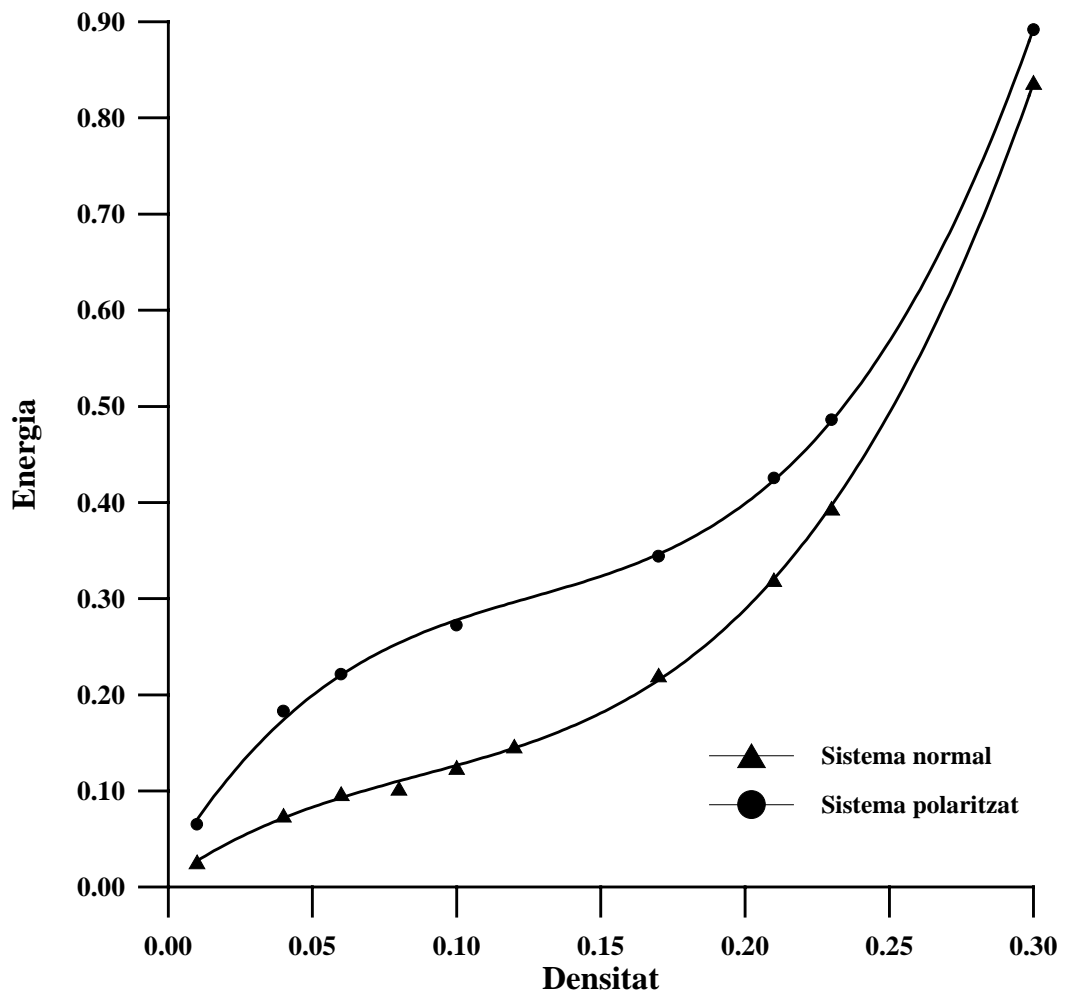


Figura 15.4

Energies (K) dels sistemes normal i polaritzat amb backflow en funció de la densitat (σ^2)

15.6 Propietats del sistema: pressió, compressibilitat i velocitat del so

És interessant comparar els resultats de la pressió dels sistemes normal i polaritzat. En el sistema polaritzat, com en el normal, l'ajust a l'energia s'ha aconseguit amb un polinomi d'ordre 3, amb la qual cosa s'ha obtingut la següent expressió per a la pressió (on com sempre la densitat s'expressa en σ^2 i l'energia en K):

$$P = \rho^2 (4.87975 - 63.7878\rho + 252.7341\rho^2) \text{ K}\sigma^{-2} \quad (15.9)$$

Aquesta corba presenta diferències amb la corresponent al sistema normal. A la figura 15.5 es poden observar totes dues.

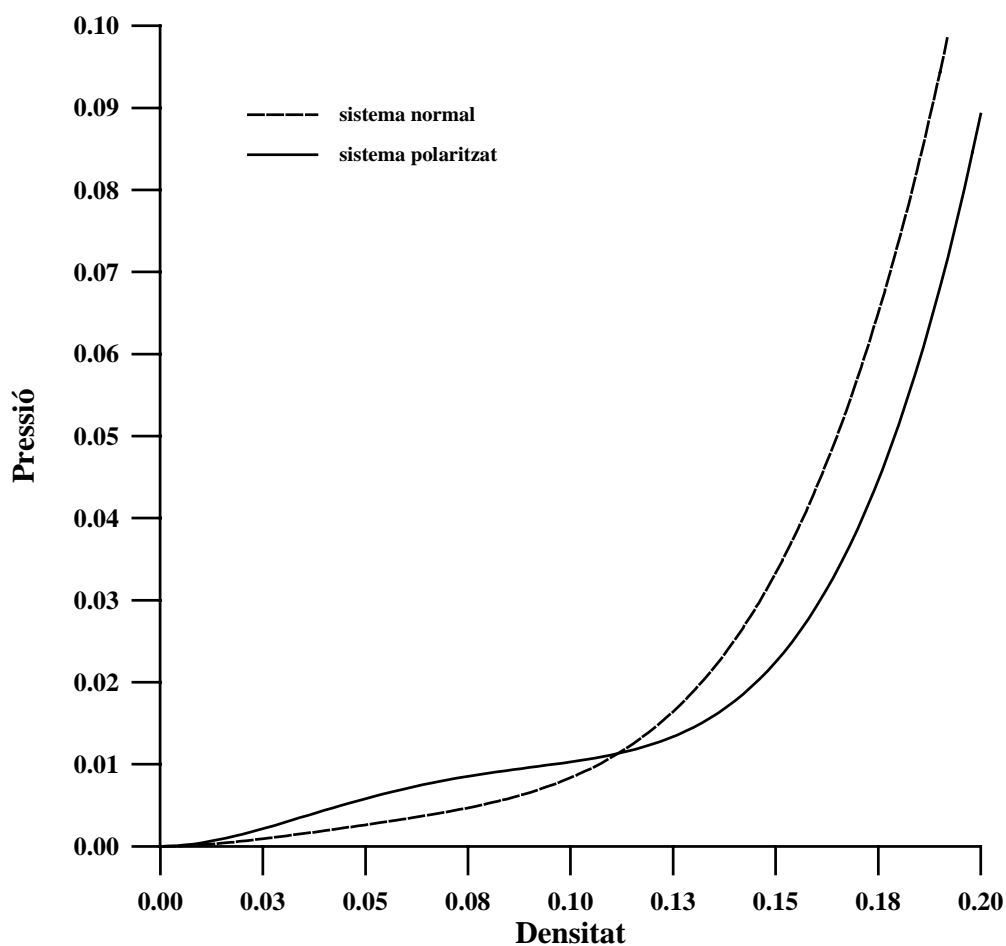


Figura 15.5

Pressió (K σ^{-2}) en funció de la densitat (σ^2) dels sistemes normal i completament polaritzat.

Destaca l'encreuament de les dues corbes a una densitat propera a $\rho = 0.12\sigma^{-2}$, que és justament la densitat a la qual s'observa la màxima diferència d'energies entre els dos sistemes.

A la representació de l'energia en funció de la densitat (figura 15.4) es veu com, a baixes densitats, l'energia del sistema polaritzat creix més ràpidament que la del sistema normal. Aquest comportament es manté fins a una densitat de $\rho = 0.12\sigma^{-2}$, a partir de la qual succeeix a l'inrevés, i la pressió del sistema normal es situa per sobre la del polaritzat. Això és així perquè els valors de l'energia tendeixen a convergir (figura 15.4). Com que a baixes densitats els efectes estadístics dominen sobre els del potencial i l'energia de Fermi en el sistema polaritzat és doble que en el normal, s'explica que els valors de la pressió del sistema polaritzat siguin aproximadament dobles als del no polaritzat.

El fet que a baixes densitats la pressió del sistema polaritzat sigui superior a la del normal pot entendre's pel fet que en aquell els àtoms no poden apropar-se tant els uns als altres degut al principi d'exclusió de Pauli. Això confina els àtoms a una regió més estreta que la permessa als àtoms del sistema normal, i degut al principi d'incertesa, la seva energia cinètica serà major que la del sistema normal. Conseqüentment, a una mateixa densitat la pressió del sistema normal és inferior a la del polaritzat.

Quan la densitat augmenta s'imposen els mecanismes de correlació dinàmics, que no distingeixen spin i tendeixen a igualar els ritmes de creixement de l'energia d'ambdós sistemes, resultant així valors per a la pressió en aquest sistema inferiors als del normal.

El marcat canvi de concavitat en la corba energia-densitat del sistema polaritzat té també conseqüències en la compressibilitat del sistema. A diferència del sistema normal que mostra un decreixement continu, el sistema polaritzat presenta canvi de concavitat amb un màxim situat a $0.09\sigma^{-2}$.

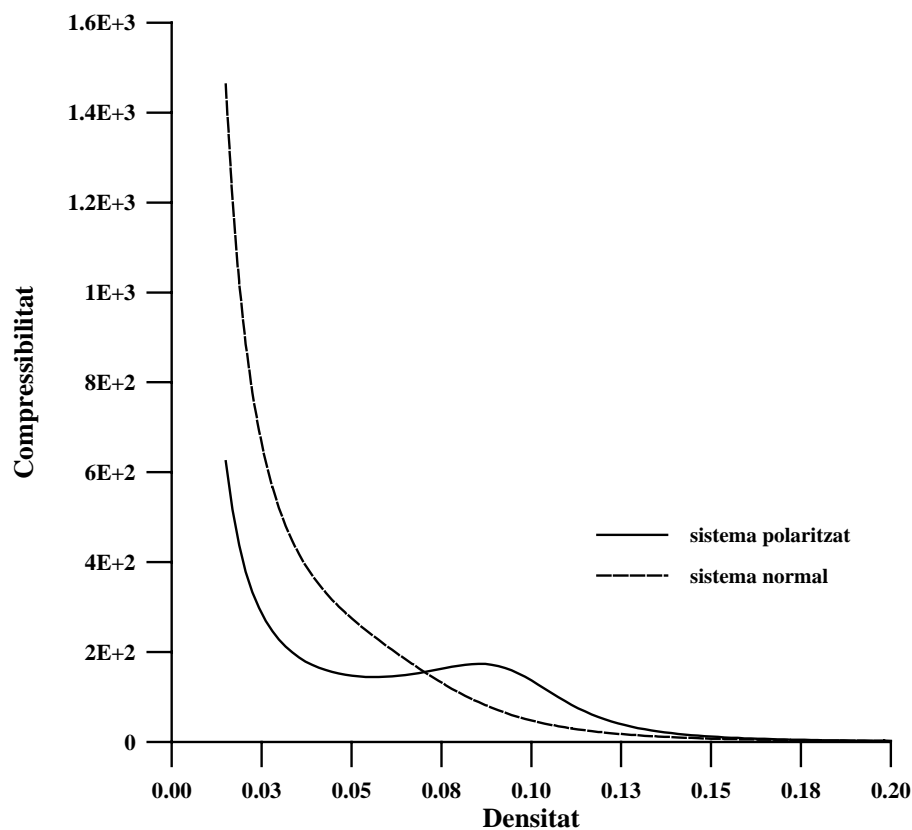


Figura 15.6

Compressibilitat ($K^{-1}\sigma^2$) en funció de la densitat (σ^{-2}) dels sistemes normal i polaritzat.

La compressibilitat es pot entendre com l'efecte d'un canvi de pressió sobre el volum del sistema. Aquesta imatge pot explicar que a molt baixes densitats el sistema polaritzat mostri una compressibilitat bastant més baixa que el sistema normal: en el sistema polaritzat la distància entre qualsevol parella d'àtoms ve limitada pel principi d'exclusió de Pauli, però sobre el sistema d'igual densitat sense polaritzar aquest principi s'aplica només sobre la meitat dels veïns de cada àtom, facilitant així la disminució de volum quan hi ha un augment de la pressió. Com que a baixes densitats les correlacions dinàmiques són molt petites, i el pes més important se l'enduen les de tipus estadístic, s'entén la menor compressibilitat del sistema polaritzat.

L'elevada diferència que s'observa per a la compressibilitat a baixa densitat entre els sistemes normal i polaritzat pot entreveure's en la corba 15.4 per la gran diferència en la concavitat de les corresponents corbes energia-densitat.

A la densitat d'uns $0.075\sigma^{-2}$ les corbes es creuen i per densitats superiors el sistema polaritzat és el qui mostra la més alta compressibilitat. El fet s'adiu amb el major

pendent que presenta la pressió del sistema polaritzat enfront del sistema normal a mitjanes i altes densitats.

A molt altes densitats ambdós sistemes prenen valors similars en la compressibilitat i tendents a anul·lar-se. Aquest límit també pot entendre's considerant el significat de la compressibilitat, ja que a molt altes densitats les interaccions tant dinàmiques com estadístiques entre partícules són molt fortes, i els dos sistemes mostrarien poques diferències entre ells.

En estar lligada a la derivada de l'energia, la velocitat del so del sistema polaritzat mostra també grans diferències respecte al sistema normal en la seva dependència amb la densitat. A la figura 15.7 es comparen ambdós resultats. Si bé a baixes densitats els dos resultats són similars en valor (no en curvatura) el sistema polaritzat mostra uns valors lleugerament més alts. Aquest comportament canvia bruscament a partir dels $0.05\sigma^{-2}$, densitat a partir de la qual la velocitat del so pren valors notablement més alts per al sistema normal, diferència que augmenta amb la densitat. És de destacar el fet que, contràriament al dictat per la intuïció, en un cert rang de densitats la velocitat del so disminueix quan augmenta la densitat. Aquest fet està possiblement relacionat amb l'existència d'una transició de fase de tipus magnètic.

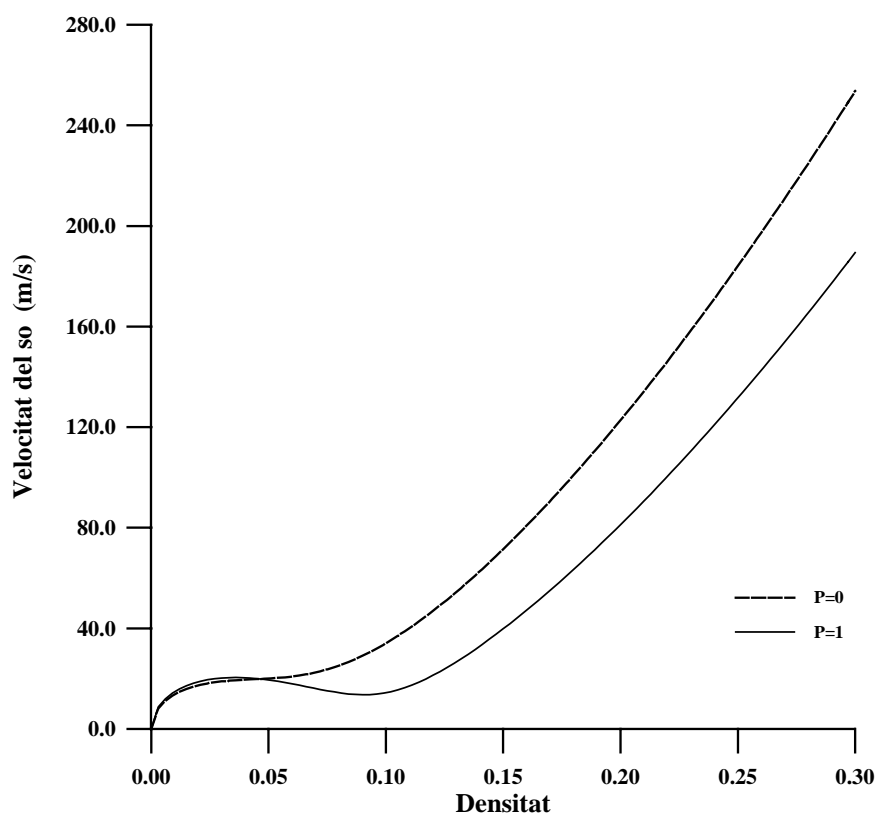


Figura 15.7

Velocitat del so (m/s) en funció de la densitat (σ^2) en els sistemes normal i polaritzat.

15.7 Càlcul aproximat de la massa efectiva

La determinació de la massa efectiva del sistema polaritzat s'ha fet de la mateixa forma que en el sistema normal. La polarització del sistema augmenta el valor de la massa efectiva, i aquest increment creix amb la densitat. Els resultats venen resumits a la taula 15.4.

Notem que els resultats obtinguts són prediccions sense contrapartida experimental, ja que només existeixen mesures fetes sobre capes d' ^3He normal. Resultats experimentals

obtinguts a 3D sobre la influència de la polarització en la massa efectiva semblen indicar un comportament contrari al que aquí s'observa.

Densitat (σ^2)	$m^*/m \Delta=0$	$m^*/m \Delta=1$	Increment relatiu (%)
0.04	1.2114	1.3110	8.2
0.06	1.3212	1.5477	17.1
0.10	1.6707	2.0380	22.0
0.17	2.1183	3.0297	43.0
0.21	2.3777	3.6315	52.7
0.23	2.6295	4.1334	57.2
0.30	3.2547	5.6418	73.3

Taula 15.4

Massa efectiva de $l^3\text{He}$ en els sistemes bidimensionals normal i polaritzat

15.8 La funció distribució radial a dos cossos $g(r)$

Aquesta funció mostra petites però clares diferències amb la del corresponent sistema normal. En el sistema polaritzat àtoms veïns tenen el mateix spin en tant que en el sistema normal el poden tenir diferent. El principi d'exclusió de Pauli farà que la distància entre àtoms veïns del sistema polaritzat sigui en general una mica més gran que la del sistema normal, i així es veu en el petit desplaçament cap a valors més grans que mostra el pic de la figura 15.8, on es comparen les funcions de distribució radial d'ambdós sistemes a la densitat $\rho = 0.23\sigma^{-2}$. Com a segona característica destaca una més acusada estructura en el sistema polaritzat, en contrast amb el sistema normal que mostra una distribució una mica més uniforme, situant-se ràpidament sobre el valor unitat i amb poques oscil·lacions.

La figura 15.9 mostra les mateixes diferències entre els dos sistemes, però en ser la densitat molt més baixa, $\rho = 0.10\sigma^{-2}$, l'estructura de les corbes és molt menys marcada. El sistema normal tendeix ràpidament a la unitat, mentre que el sistema polaritzat mostra encara petites oscil·lacions.

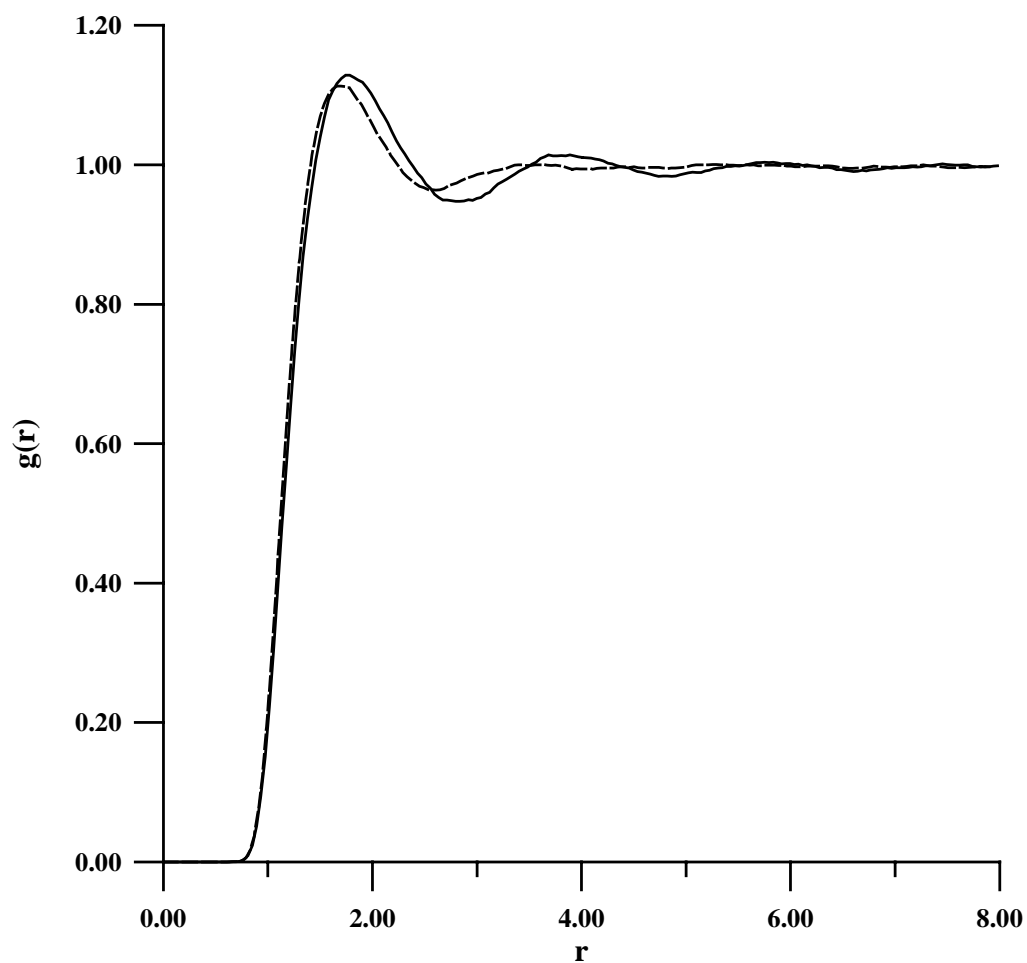


Figura 15.8

Funció de distribució radial per als sistemes normal (línia discontinua) i polaritzat (línia contínua) a la densitat $\rho = 0.23\sigma^{-2}$. La distància s'expressa en σ .

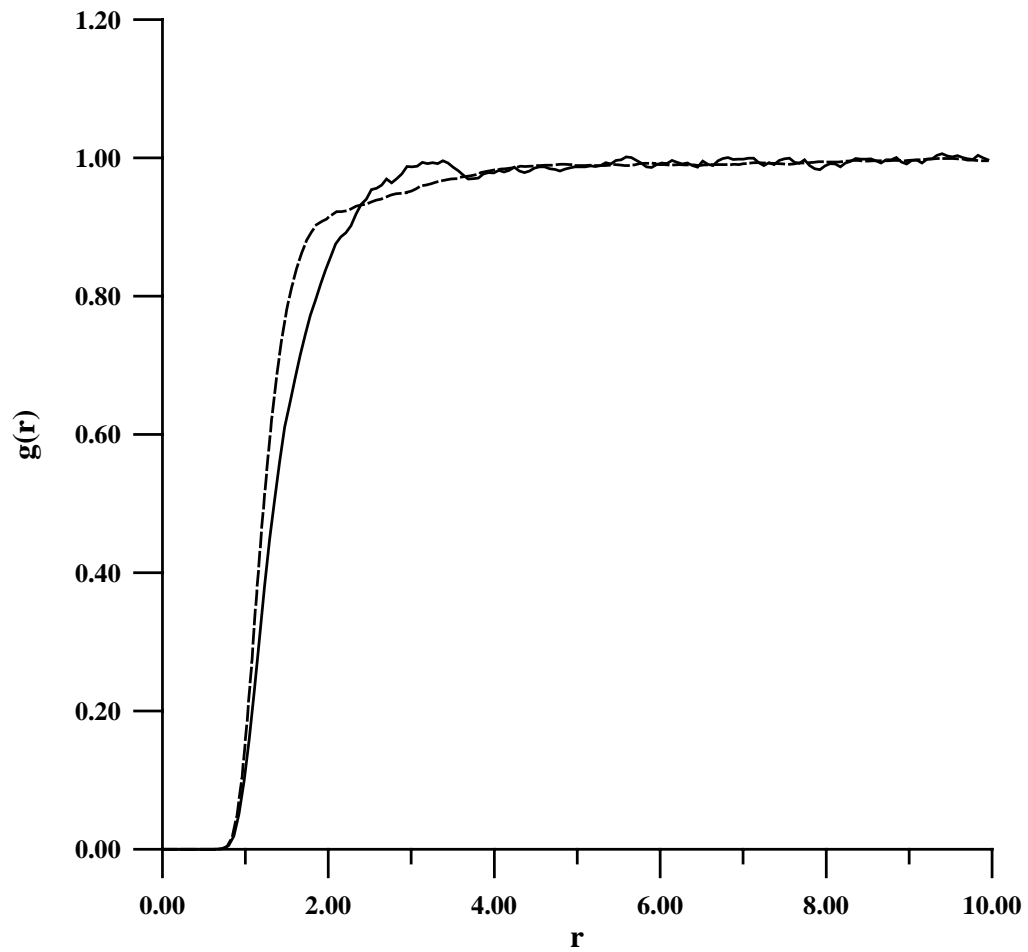


Figura 15.9

Funció de distribució radial per als sistemes normal (línia contínua) i polaritzat (línia discontinua) a la densitat $\rho = 0.10\sigma^{-2}$. La distància s'expressa en σ .