مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۲، شمارهٔ ۱، بهار ۱۳۹۱

انرژي حالت پاية قطرة مايع هليوم-۳ در چارچوب روش وردشي با پايين‌ترين مرتبة قيد

مجيد مدرس[۱] ، ساره مطهري[۲] و احمد رجبي[۲]

۱. دانشكده فيزيك، دانشگاه تهران، تهران

۲. گروه فيزيك، دانشكده علوم پايه، دانشگاه تربيت دبير شهيد رجايي، تهران

پست الكترونيكي: mmodares@ut.ac.ir

(دريافت مقاله: ۱۳۹۰/۲/۶ ؛ دريافت نسخهٔ نهايي: ۱۳۹۰/۱۰/۲۸)

چكيده

در اين كار با استفاده از روش وردشي با پايين‌ترين مرتبه قيد، و نوع توسعه يافته آن انرژي حالت پاية قطرة مايع نرمال هليوم-۳ در دماي صفر مطلق محاسبه مي‌گردد. توزيع‌هاي مختلف چگالي، از جمله گؤسي ، شبه گؤسي و وود-سكسون[۱] را مورد استفاده قرار داده و سپس نشان مي‌دهيم كه براي تشكيل حالت مقيد قطرة مايع نرمال هليوم-۳ به حداقل ۲۰ اتم هليوم نياز داريم. البته اين تخمين بسته به انتخاب توزيع‌هاي مختلف چگالي و شعاع اتم هليوم -۳ تا حدود ۳۰۰ اتم افزايش مي‌يابد. مقادير به‌دست آمده براي انرژي حالت پايه و تعداد اتم‌هاي تشكيل دهندة قطره در مقايسه با روش‌هاي ديگر از جمله روش مونت كارلوي وردشي و بخشي و روش نظريه تابعي چگالي توافق خوبي دارد.

واژه‌هاي كليدي: قطرة هليوم-۳، مايع نرمال هليوم-۳، انرژي حالت پايه ، روش وردشي، تابع توزيع چگالي، تابع توزيع گؤسي، تابع توزيع شبه گؤسي، تابع توزيع وود-سكسون، پتانسيل لنارد-جونز

۱. مقدمه

در طی بیست سال اخیر، مطالعهٔ ساختار و خواص دینامیکی قطرات مایع هلیوم توجه بسیاری از فیزیکدانان تجربی و نظری را به خود جلب کرده است [۱]. در بعد تجربی روشی مبتنی بر توری پراش توانسته موفقیت خوبی را در شناسایی قطرات هلیوم به‌دست آورد [۲]. اما کارهای نظری بر روی قطرات هلیوم اولین بار با کار پندهری پنده و همکاران [۳] با استفاده از روش مونت کارلوی وردشی و همچنین اسرینگاری و ترینر [۴] با استفاده از تقریب تابعی چگالی آغاز شد. اخیراً روش‌های نظری پیشرفت قابل ملاحظه‌ای داشته‌اند و در حال حاضر علاوه بر روش‌های ذکر شده روش‌هایی مثل روش توابع همبستهٔ جسترو، روش مونت کارلوی پخشی و روش تابعی چگالی غیر جایگزیدهٔ طیف محدود، برای قطرات هلیوم-۳ و ۴ به کار گرفته شده‌اند [۱ و ۵ و ۶].

محاسبات ذکر شده نشان داده‌اند که حداقل ۲۰ تا ۴۰ اتم هلیوم-۳ برای داشتن یک قطرهٔ در حالت مقید مورد نیاز است، اما با توجه به خواص متنوع مایع همگن هلیوم-۳ حد بالا می‌تواند به مراتب بیشتر باشد [۳].

روش وردشی با پایین‌ترین مرتبهٔ قید[۲](LOCV)، و نوع توسعه یافته آن[۳](ELOCV) توانسته به‌طور موفقیت‌آمیزی خواص متنوع تودهٔ[۴] مایعات کوانتومی همگن مثل مایع عادی هلیوم-۳ و مادهٔ هسته‌ای را به‌دست آورد [۸]. در محاسبات

۱. Wood-Saxon

۲. Lowest Order Constraint Variational

۳. Extended Lowest Order Constraint Variational

۴. Bulk

Archive of SID

www.SID.ir

پیشین توافق خوبی بین نتایج حاصل از روش LOCV و سایر روش‌های پیچیده‌تر که فراتر از پایین‌ترین مرتبهٔ توسعه یافته‌اند، حاصل شده است [۸]. همچنین نشان داده شده است که بسط خوشه‌ای به کار رفته در فرمول‌بندی LOCV، از همگرایی بالایی برخوردار است و سهم خوشه‌های سه جسمی به مراتب کمتر ازسهم خوشه‌های دو جسمی است [۹ و ۱۰]. مزایا و فرمول‌بندی این روش به طور کامل در چندین مقاله مرور و مورد بررسی قرار گرفته است [۷، ۱۱، ۱۲ و ۱۳].

در این مقاله ما با استفاده از نتایج به دست آمده از اعمال این روش در بررسی خواص تودهٔ مایع هلیوم-۳ در دمای صفر مطلق به مطالعه و بررسی حالت مقید قطرهٔ هلیوم-۳ می‌پردازیم. لازم به ذکر است که چگالی قطرهٔ مایع را همان‌طور که انتظار می‌رود، به صورت سه تابع توزیع نزولی انتخاب نموده‌ایم.

این مقاله شامل بخش‌های زیر می‌باشد: در بخش دوم ما روش مورد استفاده را به اختصار توضیح می‌دهیم. توزیع‌های مختلف چگالی، پارامترها و محاسبات مربوط به انرژی قطره، برای مایع همگن هلیوم-۳ را در بخش سوم می‌آوریم. در پایان، دربخش چهارم نتایج را نمایش داده و به بحث و بررسی می‌پردازیم.

۲. فرمول‌بندي روش LOCV براي مايع همگن هليوم-۳

هامیلتونی مایع نرمال هلیوم-۳ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H=\sum_{i=1}^{A}\frac{P_i^2}{2m_i}+\sum_{i<j\neq 1}^{A}V(ij), \qquad (1)$$

$V(r_{ij})$ پتانسیل بین اتم‌های هلیوم است که ما در محاسبات از پتانسیل لنارد- جونز استفاده کرده‌ایم [۱۵].

در روش وردشی با پایین‌ترین مرتبهٔ قید تابع موج سیستم دارای برهم کنش یعنی $\Psi(12...N)$، را به صورت حاصلضرب تابع همبستگی در تابع موج سیستم بدون برهم کنش، یعنی $\phi(12...N)$، در نظر می‌گیریم [۱۰، ۱۱ و ۱۲]:

$$\Psi(12...N)=F(12...N)\phi(12...N), \qquad (2)$$

که در آن تابع همبستگی N ذره‌ای $F(12...N)$، را می‌توان همانند جسترو به صورت مجموع حاصلضرب‌های متقارنی از توابع همبستگی دو ذره‌ای نوشت:

$$F(12...N)=\delta\left(\prod_{i>j}f(ij)\right). \qquad (3)$$

با توجه به اینکه پتانسیل بین اتمی مایع هلیوم-۳ فقط به فاصلهٔ اتم‌ها مرتبط است، لذا تابع همبستگی دوتایی را نیز تابعی از فاصلهٔ دو اتم می‌گیریم. البته وابستگی تابع همبستگی به تکانهٔ زاویه‌ای مداری و اسپینی در مراجع [۱۱] مورد بررسی قرار گرفته است. با انتخاب توابع همبستگی به صورت فوق و استفاده از بسط خوشه‌ای، می‌توان انرژی سیستم N ذره‌ای دارای برهم‌کنش را به صورت زیر بسط داد [۱۰، ۱۱ و ۱۲].

$$E=T_F+E_{MB}[f]. \qquad (4)$$

T_F همان انرژی جنبشی بر واحد ذرهٔ گاز فرمیونی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$T_F=\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{k_F}\frac{(\hbar k)^2}{2m}=\frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_f{}^2}{2m}. \qquad (5)$$

$E_{MB}[f]$ که انرژی ناشی از برهم کنش است، به صورت بسط خوشه‌ای و با استفاده از اصل وردشی به صورت زیر به دست می‌آید [۱۰-۱۲ و ۱۴].

$$E[f]=\frac{1}{N}\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}=T_F+E_{MB}, \qquad (6)$$
$$=T_F+E_2+E_3+....$$

E_2، انرژی خوشه‌های دوجسمی است و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E_2=\sum_{i>j}\langle ij|\upsilon(12)|ij\rangle_a. \qquad (7)$$

به $\upsilon(12)$ ، پتانسیل موثر دو جسمی گویند که برحسب تابع همبستگی، $f(12)$، و پتانسیل بین اتمی لنارد- جونز، $V(12)$، به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\upsilon(12)=-\frac{\hbar^2}{m}\left(\nabla_r f(r)\right)^2+f^2(r)V(12). \qquad (8)$$

حال با به کارگیری توابع موج تخت برای تک ذرهٔ عبارت مربوط به خوشه‌های دوجسمی را به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$E_2=\frac{1}{2}\rho\int g_F(r)\upsilon(r)d^3r, \qquad (9)$$

که در آن

$$g_F(r)=[1-\frac{1}{2}\ell^2(k_F r)], \qquad (10)$$

Archive of SID

www.SID.ir

و

$$\ell(x)=3\frac{J_1(x)}{x}.$$

$J_1(x)$ تابع آشنای بسل کروی مرتبهٔ یک هست. قید بهنجارش توابع موج به صورت زیر داده می‌شود [۱۰]:

$$\rho\int(g_2(r_{12})-1)d^3r_{12}=-1, \qquad (11)$$

در این رابطه $g_2(r_{12})$ ، تابع توزیع دوجسمی است و به صورت زیر بسط داده می‌شود [۱۴]

$$g_2(r_{12})=f^2(r_{12})\left[\sum_{n=2}^{N}\Delta g(r_{12})\right]_n. \qquad (12)$$

دو جملهٔ اول بسط، که قصد داریم از آنها استفاده کنیم، عبارت‌اند از:

$$\Delta[g_2(r_{12})]_2=g_f(r_{12})r_{13}$$
$$h(r_{13})[\ell^2(k_Fr_{23})-\ell(k_Fr_{12})\ell(k_Fr_{23})\ell(k_Fr_{13})] \qquad (13)$$
$$+\rho\int d^3r_{13}h(r_{13})h(r_{23})g_{3F}(r_{12},r_{23},r_{13}),$$

که در آن

$$g_{3F}(r_{12},r_{23},r_{13})=1-\frac{1}{2}[\ell^2(k_Fr_{12})+\ell^2(k_Fr_{23}) \qquad (14)$$
$$+\ell^2(k_Fr_{13})+\frac{1}{2}\ell(k_Fr_{12})\ell(k_Fr_{23})\ell(k_Fr_{13})].$$

با وارد کردن جملهٔ مربوط به $n=2$ ، در بسط تابع توزیع دوجسمی قید بهنجارش به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\rho\int(g_F(r)^{-1}-f(r)^2)(g_F(r)d^3r=-1, \qquad (15)$$

یا

$$\langle\psi|\psi\rangle=\rho\int g_F(r)f^2(r)d^3r=1.$$

این قید در کارهای قبلی ما به کار برده شده است [۱۰ - ۱۲]. لازم به ذکر است کمیت $\zeta=\langle\psi|\psi\rangle-1$، همگرایی بسط خوشه‌ای را توصیف می‌کند. برای وارد کردن قید فوق در به دست آوردن انرژی از روش ضرایب نامعین لاگرانژ بهره می‌بریم. با استفاده از معادلهٔ اولر-لاگرانژ، عبارت $L(r,f,f')=r^2\{E_2+\lambda\langle\psi|\psi\rangle\}[f]$ را نسبت به تابع $f(r)$ به صورت تابعی کمینه می‌کنیم و ضریب نامعین لاگرانژ، λ ، را طوری انتخاب می‌نماییم که قید بهنجارش نیز ارضا شود. در روش LOCV فرض می‌شود که تابع همبستگی دو ذره‌ای، $f(r)$ ، در یک فاصلهٔ مشخصی به تابع همبستگی دو ذره‌ای فرمیونی پاولی، $f_p(r)=(g_F(r))^{-\frac{1}{2}}$، میل کند. این انتخاب به نوعی اثرات همبستگی ناشی از آمارکوانتومی ذرات را نیز وارد محاسبات ما می‌کند. طبیعی است که با در نظر گرفتن این شکل تابع همبستگی باید نتایج بهتری بگیریم. البته خود تابع پاولی در نهایت در فواصل دورتر به یک میل می‌کند.

شایان ذکر است که در عبارت تابع توزیع دو جسمی برای $n=3$ به یک معادله دیفرانسیلی انتگرالی می‌رسیم که اگر سهم ناشی از این جمله را وارد محاسبات کنیم روش وردشی با پایین‌ترین مرتبهٔ قید، LOCV ، به روش توسعه یافته، ELOCV، ارتقاء می‌یابد، که نتایج حاصل از آن با روش‌های مونت کارلوی وردشی و پخشی مشابه خواهد شد [۷، ۱۰ و ۱۲]. در نهایت با توجه به توضیحات بالا داریم:

$$E_{ELOCV}=T_F+E_2+E_3 \qquad E_{LOCV}=T_F+E_2. \qquad (16)$$

۳. توزیع‌های چگالی و محاسبهٔ انرژی برای قطرهٔ مایع هلیوم-۳

برای نحوهٔ توزیع اتم‌ها در درون قطره، با فرض این‌که قطر کره‌ای به شعاع R باشد، از سه تابع توزیع چگالی استفاده می‌کنیم.

الف- تابع توزیع گوسی (موج-S)

$$\frac{1}{N}\rho_G(r)=\rho_G(r)=\rho(r)=\rho_0e^{-\alpha r^2}, \qquad (17)$$

با بهنجار کردن توزیع‌های چگالی و در نظر گرفتن جذر میانگین مربعی r^2، به عنوان شعاع قطره، مقادیر ρ_0 و α قابل محاسبه می‌شوند

$$\int\rho_j(r)dr=1, \qquad (18)$$

و

$$R^2=\int r^2\rho_j(r)dr,$$
$$\rho_0=(\frac{3}{2}\frac{1}{\pi R^2})^{3/2}, \qquad (19)$$

و

$$\alpha=\frac{3}{2}\frac{1}{R^2}.$$

ب- تابع توزیع شبه گوسی (امواج S و P)

$$\rho_{QG}(r)=\rho_0[1+2\alpha r^2]e^{-\alpha r^2}. \qquad (20)$$

Archive of SID

www.SID.ir

جدول ۱. انرژی بستگی، شعاع و تعداد اتم‌های یک قطره برحسب روش اعمال شده، تابع توزیع چگالی به کار رفته و شعاع توضیح داده شده در متن.

تابع توزیع چگالی	روش اعمال شده	$R_{\min}(A^{\circ})$	$E_{\min}(K)$	$r_{\circ}(A^{\circ})$	$N_{\min}$
تابع توزیع گوسی	LOCV	۲٫۷۰	−۰٫۳۷۷	۰٫۳۱	۳۹۶
		۲٫۷۰	−۰٫۳۷۷	۰٫۴۹	۱۰۰
		۲٫۷۰	−۰٫۳۷۷	۰٫۷۲	۳۲
	ELOCV	۲٫۵۰	−۰٫۸۶۰	۰٫۳۱	۳۱۶
		۲٫۵۰	−۰٫۸۶۰	۰٫۴۹	۸۰
		۲٫۵۰	−۰٫۸۶۰	۰٫۷۲	۲۵
تابع توزیع شبه گوسی	LOCV	۲٫۳۸	−۰٫۷۱۴	۰٫۳۱	۲۷۲
		۲٫۳۸	−۰٫۷۱۴	۰٫۴۹	۶۹
		۲٫۳۸	−۰٫۷۱۴	۰٫۷۲	۲۲
	ELOCV	۲٫۱۹	−۱٫۳۸۰	۰٫۳۱	۲۱۲
		۲٫۱۹	−۱٫۳۸۰	۰٫۴۹	۵۴
		۲٫۱۹	−۱٫۳۸۰	۰٫۷۲	۱۷
تابع توزیع وود- سکسون	LOCV	۲٫۳۸	−۰٫۷۷۶	۰٫۳۱	۲۷۲
		۲٫۳۸	−۰٫۷۷۶	۰٫۴۹	۶۹
		۲٫۳۸	−۰٫۷۷۶	۰٫۷۲	۲۲
	ELOCV	۲٫۱۷	−۱٫۴۴۵	۰٫۳۱	۲۰۲
		۲٫۱۷	−۱٫۴۴۵	۰٫۴۹	۵۲
		۲٫۱۷	−۱٫۴۴۵	۰٫۷۲	۱۷

همانند توزیع گوسی در این قسمت نیز با استفاده از معادلات رابطهٔ (۱۸)، $\rho_{\circ}$ و α را به دست می‌آوریم که به ترتیب زیر می‌باشند:

$$\rho_{\circ} = \frac{1}{4}\left(\frac{9}{4}\frac{1}{\pi R^2}\right)^{3/2} , \qquad (۲۱)$$

و

$$\alpha = \left(\frac{3}{2R}\right)^2 .$$

پ- تابع توزیع وود- سکسون

$$\rho_{ws}(r) = \frac{\rho_{\circ}}{1+\exp\left[\frac{r-R}{a}\right]} . \qquad (۲۲)$$

در رابطهٔ فوق $\rho_{\circ}$ چگالی در مرکز هسته است، a ضخامت سطح و R شعاع قطره می‌باشد. در این قسمت هم با استفاده از رابطه (۱۸) شکل توزیع را به دست می‌آوریم، با این تفاوت که این بار معادلات را به صورت عددی حل می‌نماییم.

بعد از این مراحل به سراغ محاسبهٔ انرژی می‌رویم که انرژی بر واحد ذره از رابطهٔ زیر قابل محاسبه است.

$$E^{i,j}_{droplet}(R) = \int E_i[\rho_j(r)]\rho_j(r)dr . \qquad (۲۳)$$

در رابطهٔ فوق i=LOCV ,ELOCV و j=G, QG or WS می‌باشند. لازم به ذکر است که E_i و $E^{i,j}_{droplet}(R)$ به ترتیب توابعی از $\rho_j(r)$ و R هستند.

۴. نتایج و بررسی

در جدول ۱ نتایج به دست آمده با استفاده از دو روش مذکور و توزیع‌های مختلف چگالی آورده شده است. $r_{\circ}$ شعاع اتم هلیوم است که از $0.31A^{\circ}$ تا $0.72A^{\circ}$ متغیر است. اما به این نکته هم باید توجه داشت که اتم‌ها درون قطره می‌توانند با یکدیگر همپوشانی داشته باشند. که میزان همپوشانی از رابطهٔ $\bar{r}_{\circ} = \left(\frac{5}{3}\right)^{1/3} r_{\circ}$ به‌دست می‌آید. از طرف دیگردانستن تعداد

Archive of SID

www.SID.ir

جدول۲. انرژی بستگی و تعداد اتم‌های یک قطره برحسب روش‌های اعمال شده توسط گروه‌های مختلف.

مرجع	روش مورد استفاده	تعداد اتم‌های یک قطره	انرژی بستگی یک قطره بر حسب کلوین
[۳]	VMC	۴۰-۲۴۰	(-۰٫۰۳۶۲) - (-۰٫۷۴۳)
[۶]	DFT	۲۹	-۰٫۰۸۶
[۱۶]	DMC	۳۰-۷۰	(-۰٫۰۰۰۶) - (-۰٫۴۱۲)

اتم‌های تشکیل دهندهٔ قطره هلیوم نیز برای ما مهم است که می‌توان از رابطهٔ زیر آن را محاسبه نمود.

$$N_{droplet} = \left(\frac{R}{r_0} \right)^3 . \qquad (۲۴)$$

در جدول ۱ ما مهم‌ترین خواص حالت پایهٔ قطرهٔ هلیوم از جمله کمینهٔ انرژی نسبت به شعاع قطره را آورده‌ایم. با توجه به این جدول نتایج دو توزیع شبه گؤسی و وود سکسون بسیار نزدیک به یکدیگرند و مطابق انتظار ازروش ELOCV نتایج بهتری حاصل شده است که از آن جمله می‌توان به این مطلب اشاره کرد که انرژی بر واحد ذره K ۱٫۴- به‌دست آمده که بسیار نزدیک به انرژی بر واحد ذرهٔ مایع یکنواخت هلیوم-۳ است. از سوی دیگر تعداد اتم‌های درون یک قطره از ۲۰ تا ۳۰۰ اتم هلیوم بسته به انتخاب شعاع اتم هلیوم آزاد متغیر است.

نکتهٔ جالب دیگر اینکه شعاع قطرهٔ هلیوم-۳مقداری بین A° ۲٫۱۷ و A° ۲٫۷ دارد که تقریباً ثابت است.

در نهایت در جدول ۲ نتایج حاصل از روش‌های دیگر از جمله روش مونت کارلوی وردشی (VMC) ، روش مونت کارلوی پخشی (DMC) و روش نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) را آورده‌ایم. همان‌طور که مشاهده می‌شود نتایج حاصل از این گزارش با نتایج روش‌های پیچیدهٔ مذکور توافق کلی دارد.

به طور خلاصه ما از روش بس ذره‌ای برای محاسبه خواص قطره‌های هلیوم-۳ بهره برده‌ایم. محاسبات ما نشان می‌دهد که بسته به انتخاب تابع توزیع چگالی و شعاع‌های مختلف اتمی، تعداد اتم‌های تشکیل دهندهٔ قطرات مایع هلیوم-۳ می‌تواند حدوداً بین ۲۰ تا ۳۰۰ ذره متغیر باشد.

مراجع

1. M Barranco et al, *J. Low. Tem. Phys*. **142** (2006) 1.
2. W Schoelkopf and J P Toennies, *Sience* **256** (1994) 1345.
3. V R Pandharipande , S C Pieper and R B Wiringa, *Phys. Rev.* C **34** (1986) 4571.
4. S Sringari and J Treiner, *J. Chem. Phys*. **87** (1987) 5021.
5. S Weisgerber and P G Reinhard, *Z. Phys*. D **23** (1992) 275.
6. M Barranco, J Navarro and A Poves, *Phys. Rev. Lett*. **78** (1997) 4729; R Guardiola and J Navarro, *Phys. Rev*. A **71** (2005) 035201.
7. M Modarres and A Rajabi, *Euro. Phys*. *J*. B **71**(2009) 7.
8. J C Owen, R F Bishop and J M Irvine, *Nucl. Phys*. A **277** (1977) 45; M Modarres and J M Irvine, *J. Phys G: Nucl. Phys.* **5** (1979) 511; M Modarres, J. *Phys.* G: *Nucl. Phys.* **19** (1993) 1349. G H Bordbar and M Modarres, *Phys. Rev*. C **57** (1998) 714; M Modarres and G H Borbar, *Phys. Rev*. C **58** (1998) 2781. M Modarres and H R Moshfegh, *Phys. Rev*. C **62** (2000) 044308.
9. M Modarres and J M Irvine, *J. Phys. G: Nucl. Phys*, **5** (1979) 7; M Modarres, A Rajabi and H R Moshfegh, *Phys. Rev*. C **76** (2007) 064311.
10. M Modarres, H R Moshfegh and K Fallahi, *Eur. Phys. J*. B **36** (2003) 485.
11. M Modarres, *Int. J. Mod. Phys*. B **19** (2005) 1793; M Modarres, *J. Low. Temp. Phys*. **139** (2005) 314.
12. M Modarres and H R Moshfegh, *Physica* A **387** (2008) 2731.
13. M Modarres, A Rajabi and H R Moshfegh, *Nucl. Phys*. A **808** (2008) 60; M Modarres, *Europhys. Lett*. **3** (1987) 1083.
14. J W Clark, *Prog. Part. Nucl. Phys*. **2** (1979) 89. E Feenberg, "*Theory of Quantum Liquids*", Academic press, New York, (1969).
15. J de Boer and A Michels, *Physica* **6** (1939) 409; R A Aziz *et al*. *J. Chem.Phys*. **70** (1979) 4330.
16. E Sola, J Casulleras and J Boronat, *Phys. Rev*. B **73** (2006) 092515.

Archive of SID

www.SID.ir