

محاسبه خصوصیات ترمودینامیکی مایع هلیوم-۳ دو بعدی

غلامحسین بردبار*، فاطمه شاکر

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران

چکیده

در این مقاله از یک روش وردشی بر اساس بسط خوشه‌ای انرژی استفاده شده است؛ تا انرژی آزاد، آنتروپی، معادله حالت، ظرفیت گرمایی و تراکم‌ناپذیری مایع هلیوم-۳ دو بعدی را در دمای معین محاسبه نماییم. در این محاسبات، پتانسیل لئارد-جونز را به‌عنوان پتانسیل برهم‌کنش بین اتم‌های هلیوم در نظر گرفته‌ایم. محاسبات نشان می‌دهند که انرژی آزاد سیستم با افزایش چگالی، افزایش و با افزایش دما، کاهش می‌یابد. همچنین نشان داده‌ایم که مایع هلیوم-۳ دو بعدی دارای حالت مقیدی نیست. نتایج محاسبات ما نشان می‌دهند که با افزایش دما، معادله حالت سیستم سخت‌تر می‌شود. برای ظرفیت گرمایی در حجم ثابت دیده شده است که در دمای بالا به مقدار حدی k_B می‌رسد، یعنی در این حالت سیستم مورد نظر ما دارای رفتاری شبیه یک گاز ایده‌آل دو بعدی کلاسیک می‌باشد. همچنین نتایج ما نشان داده‌اند که با افزایش چگالی و دما سیستم مورد نظر تراکم‌ناپذیرتر می‌شود.

کلیدواژگان: مایع هلیوم-۳ دو بعدی، انرژی آزاد، معادله حالت، ظرفیت گرمایی، تراکم‌ناپذیری

مقدمه

در چند دهه گذشته، تلاش‌های تجربی و نظری پیوسته‌ای برای آشکارسازی ویژگی‌های مایعات فرمی شبه دو بعدی انجام شده است. به‌طور نظری انرژی حالت پایه هلیوم دو بعدی جذب شده روی گرافیت به‌دست آورده شده است [۱، ۲]. معادله حالت مایع هلیوم-۳ دو بعدی در دمای صفر به‌کمک روش مونت کارلو محاسبه شده است [۳]. ظرفیت گرمایی هلیوم-۳ جذب شده روی گرافیت در محدوده نسبتاً وسیعی از دما گزارش شده است [۴-۷].

در سال‌های اخیر، ما مایع هلیوم-۳ را مورد مطالعه قرار داده‌ایم و بعضی از ویژگی‌های ترمودینامیکی آن را در دمای صفر مطلق و دمای معین محاسبه کرده‌ایم [۸-۸].

مایع هلیوم-۳ سیستم مناسبی است تا توسط آن همبستگی بین سیستم‌های فرمیونی بس‌ذره‌ای برهم‌کنش‌کننده مطالعه شود. این مایع در دمای صفر کاملاً متفاوت با مایعات معمولی عمل می‌کند. یک موضوع مورد علاقه کنونی، رفتار ماده با کاهش بعد است. فیلم تک لایه‌ای هلیوم، یک مدل کاملاً جذابی از رفتار سیستم‌های شبه دو بعدی را فراهم می‌آورد. اتم‌های هلیوم به‌وسیله نیروهایی که ماهیت وان‌دروالس دارند، به یک زیر لایه مسطح مانند گرافیت محدود می‌شوند. ایجاد لایه‌های نازک یا پوشش‌ها بر روی این سطوح، افزایش کارایی یا محافظت سطوح را به دنبال دارد و کاربرد عمده‌تاً الکترونیکی دارند.

* ایمیل نویسنده مسئول: bordbar@physics.susc.ac.ir

$$E = E_1 + E_2 \quad ۲$$

در معادله بالا، انرژی خوشه تک جسمی بر ذره (E_1) عبارت است از:

$$E_1 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} n_k \quad ۳$$

با انجام محاسبات لازم، انرژی تک جسمی بر ذره برای این سیستم دو بعدی به صورت زیر در می آید:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2\pi m \rho} \int_0^\infty \frac{k^3 dk}{\exp[\beta(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu)] + 1} \quad ۴$$

در معادله ۲، انرژی خوشه دو جسمی بر ذره (E_2) از رابطه زیر به دست می آید:

$$E_2 = \frac{1}{2N} \sum_{ij} \langle ij | w(12) | ij - ji \rangle \quad ۵$$

که $w(12)$ پتانسیل مؤثر دو جسمی است و به صورت زیر تعریف می شود:

$$w(12) = \frac{\hbar^2}{m} (\nabla f(r_{12}))^2 + f^2(r_{12}) V(r_{12}) \quad ۶$$

در رابطه بالا $V(r_{12})$ پتانسیل برهم کنش بین ذرات و $f(r_{12})$ تابع همبستگی دو جسمی است. در این محاسبات، ما از پتانسیل لئارد-جونز به عنوان پتانسیل برهم کنش بین اتم های هلیوم استفاده می کنیم:

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad ۷$$

$$\varepsilon = 10.22K, \sigma = 2.556 \text{ \AA} \quad ۸$$

خصوصیات ترمودینامیکی سیستم در دمای معین را می توان به کمک انرژی آزاد، F ، محاسبه کرد:

$$F = E - TS \quad ۹$$

در رابطه فوق، S آنتروپی سیستم بر ذره می باشد که برای یک سیستم متشکل از N فرمیون عبارت است از [۱۴]:

[۱۲]. در این محاسبات، از روش وردشی بر اساس بسط خوشه ای انرژی استفاده شده است. این شیوه یک روش قوی برای محاسبات بس ذره ای ماده چگال است. چون برهم کنش های بین اتمی کوتاه برد هستند، سهم خوشه سه جسمی و مراتب بالاتر در بسط خوشه ای کوچک هستند. بنابراین می توان از این جملات در محاسبات صرف نظر نمود [۱۰].

اخیراً، ما با استفاده از این روش، خصوصیات ترمودینامیکی مایع هلیوم-۳ دو بعدی در دمای صفر را بررسی کرده ایم و به یک توافق خوب با مقادیر تجربی رسیده ایم [۱۳]. حال در این مقاله، می خواهیم از روش فوق برای محاسبه انرژی آزاد، فشار و ظرفیت گرمایی مایع هلیوم-۳ دو بعدی در دمای معین، با به کارگیری پتانسیل لئارد-جونز، استفاده نماییم.

روش انجام محاسبات

یک سیستم دو بعدی متشکل از N اتم هلیوم-۳ برهم کنش کننده را در نظر می گیریم. این اتم ها دارای یک تابع توزیع فرمی-دیراک به صورت زیر هستند:

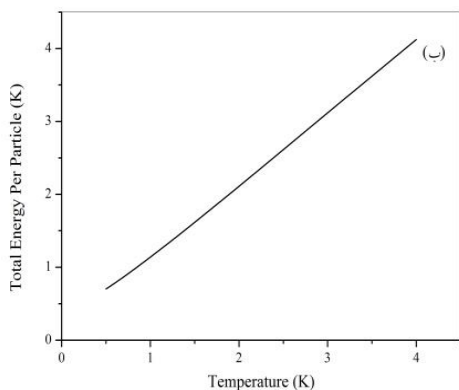
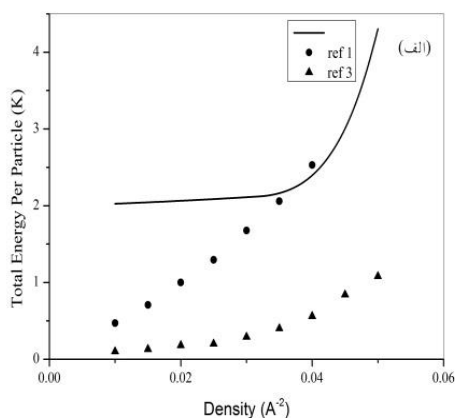
$$n_k = \frac{1}{\exp[\beta(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu)] + 1} \quad ۱$$

که $\beta = \frac{1}{k_B T}$ (T دمای سیستم و k_B ثابت

بولتزمن) و μ پتانسیل شیمیایی است. چگالی (تعداد ذرات در واحد سطح) این سیستم برابر است با

$$\rho = \frac{N}{A}$$

حال برای محاسبه خصوصیات ترمودینامیکی این سیستم، ابتدا انرژی داخلی آن را با استفاده از یک روش بس ذره ای که بر پایه بسط خوشه ای استوار است، محاسبه می کنیم [۱۱]. ما در اینجا جملات اول و دوم در بسط خوشه ای انرژی را در نظر می گیریم:



شکل ۱. انرژی کل بر ذره مایع هلیم-۳ دو بعدی (الف) برحسب چگالی در دمای $T = 2K$ (ب) برحسب دما در چگالی A^{-2} $\rho = 0.03$

در شکل ۲ نتایج مربوط به آنتروپی مایع هلیم-۳ دو بعدی به صورت تابعی از چگالی و دما رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود آنتروپی با کاهش دما و افزایش چگالی کاهش می‌یابد و این با انتظارات ما مطابقت دارد. در واقع آنتروپی، معیاری از بی‌نظمی سیستم است که هرچه دما کاهش یا چگالی افزایش می‌یابد تعداد حالت‌های قابل دسترس سیستم کاهش

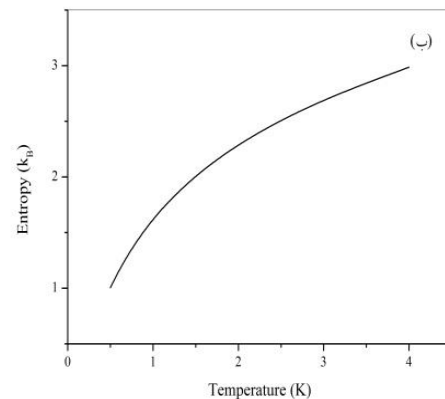
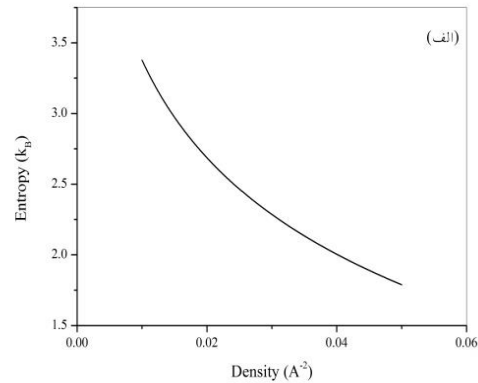
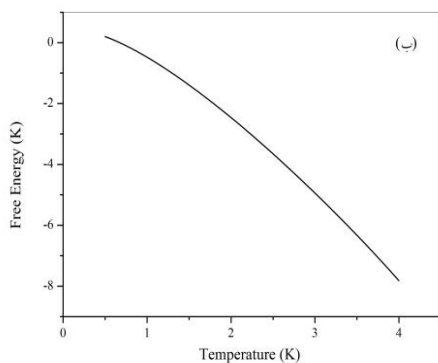
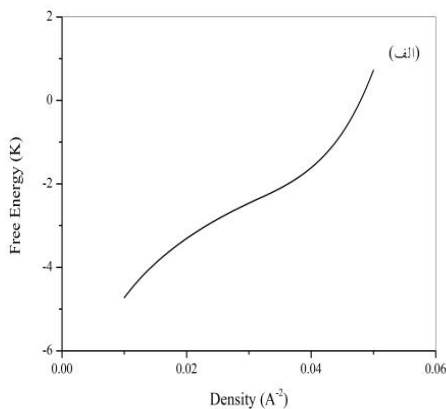
$$S = -\frac{k_B}{N} \sum_k [n_k \ln(n_k) + (1-n_k) \ln(1-n_k)] \quad 10$$

نتایج محاسبات

نتایج محاسبات ما برای انرژی کل بر ذره مایع هلیم-۳ دو بعدی (رابطه ۲) به صورت تابعی از دما و چگالی در شکل ۱ آورده شده است. با توجه به بخش (الف) این شکل می‌بینیم که انرژی این سیستم دو بعدی در یک دمای خاص، با افزایش چگالی افزایش می‌یابد. همان‌طور که مشاهده می‌کنیم این افزایش در چگالی‌های بالاتر از حدود $0.035 A^{-2}$ قابل‌ملاحظه‌تر است. همچنین از بخش (ب) این شکل مشخص است که انرژی کل بر ذره با افزایش دما افزایش می‌یابد. در شکل ۱ نتایج دیگران [۳۱] برای انرژی کل بر ذره مایع هلیم-۳ دو بعدی نیز به منظور مقایسه آورده شده است. همان‌طور که از شکل ۱ مشخص است تفاوت قابل‌ملاحظه‌ای بین نتایج ما و دیگر نتایج آورده شده، وجود دارد. یکی از دلایل این تفاوت می‌تواند در رابطه با در نظر گرفتن اثر برهم‌کنش اتم‌های هلیم با زیرلایه در نظر گرفته شده در مراجع مذکور باشد، که این برهم‌کنش با زیرلایه در محاسبات ما در نظر گرفته نشده است. لازم به ذکر است که ما در کارهای بعدی خود اثر زیرلایه را در نظر گرفته‌ایم که محاسبات مربوطه در حال انجام می‌باشد.

می‌یابد و سیستم به سمت نظم بیشتر پیش می‌رود. به عبارتی آنتروپی سیستم کاهش می‌یابد.

چگالی، با افزایش دما کاهش می‌یابد. با توجه به معادله ۹ می‌توان دریافت که افزایش سهم جمله TS با دما، بر افزایش سهم جمله E غلبه نموده و بنابراین F کاهش پیدا کرده است.



شکل ۲. آنتروپی مایع هلیم-۳ دو بعدی (الف) برحسب چگالی در دمای $T = 2K$ و (ب) برحسب دما در چگالی $\rho = 0.13 A^{-2}$.

شکل ۳. انرژی آزاد مایع هلیم-۳ دو بعدی (الف) برحسب چگالی در دمای $T = 2K$ و (ب) برحسب دما در چگالی $\rho = 0.13 A^{-2}$.

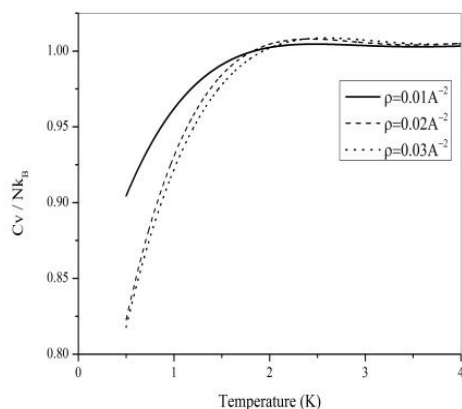
همان‌طور که می‌دانیم، فشار یک سیستم در دمای ثابت با استفاده از رابطه زیر به دست می‌آید،

$$p(\rho) = \rho^2 \frac{\partial F}{\partial \rho} \quad 11$$

در شکل ۴ نمودار فشار مایع هلیم-۳ دو بعدی به صورت تابعی از چگالی در دماهای مختلف رسم شده است. همان‌طور که می‌بینیم فشار سیستم با افزایش دما،

نتایج محاسبات ما برای انرژی آزاد مایع هلیم-۳ دو بعدی در شکل ۳ آورده شده است. همان‌طور که در بخش (الف) این شکل می‌بینیم در هر دمای معین، انرژی آزاد این سیستم با افزایش چگالی افزایش می‌یابد. همچنین در این نمودار هیچ نقطه کمینه‌ای برای انرژی آزاد دیده نمی‌شود. این عدم وجود نقطه کمینه در نمودار انرژی آزاد بیانگر این است که سیستم مورد نظر ما دارای حالت مقیدی نیست. در بخش (ب) این شکل نیز مشاهده می‌کنیم که انرژی آزاد در هر

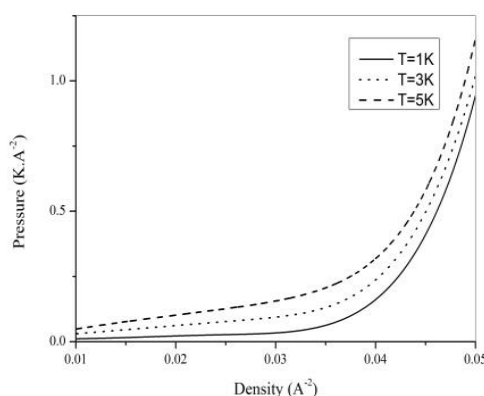
دیگر، همان‌طور که دما افزایش پیدا می‌کند سیستم همانند یک گاز ایده‌آل کلاسیکی رفتار می‌نماید.



شکل ۵. ظرفیت گرمایی در حجم ثابت برای مایع هلیم-۳ دو بعدی برحسب دما در چگالی‌های (ρ) مختلف.

تراکم‌ناپذیری مایع ^3He دو بعدی برحسب چگالی برای دماهای مختلف در شکل ۶ آورده شده است. همان‌طور که در این شکل مشخص است، با افزایش دما و چگالی تراکم‌ناپذیری افزایش می‌یابد. این نشان‌دهنده این است که با افزایش دما و چگالی، سیستم تراکم‌ناپذیرتر می‌شود. همچنین مشاهده می‌شود که در چگالی‌های بالاتر از 0.034 A^{-2} ، آهنگ افزایش تراکم‌ناپذیری بسیار بزرگ می‌باشد.

افزایش می‌یابد. این موضوع نشان‌دهنده این است که معادله حالت سیستم با افزایش دما سخت‌تر می‌شود. در واقع با افزایش چگالی، فشار سیستم افزایش می‌یابد و سیستم تراکم‌ناپذیرتر می‌شود. طبق نمودار به دست آمده با افزایش چگالی، اختلاف فشار بین دماهای مختلف زیاد می‌شود.



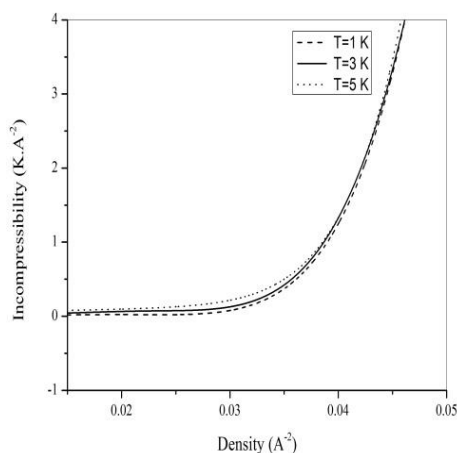
شکل ۶. معادله حالت مایع هلیم-۳ دو بعدی در دماهای (T) مختلف.

ما گرمای ویژه در حجم ثابت برای مایع هلیم-۳ دو بعدی را با استفاده از انرژی کل بر ذره محاسبه کرده‌ایم $(C_v = \frac{\partial E}{\partial T})$. نتایج این محاسبات در شکل ۵ آمده است. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌کنیم، در هر چگالی با افزایش دما، ظرفیت گرمایی ابتدا با شیب تندی افزایش می‌یابد. سپس در دماهای بالاتر از حدود 2 K ، با آهنگ ملایمی تغییر نموده و نهایتاً به مقدار حدی $1 k_B$ می‌رسد. با توجه به شکل ۵ مشاهده می‌شود که تقریباً در تمام چگالی‌ها در دماهای بالاتر از حدود $3/5 \text{ K}$ ، ظرفیت گرمایی به مقدار $1 k_B$ میل می‌کند. این نشان می‌دهد که در این حالت، سیستم مانند یک گاز ایده‌آل دوبعدی کلاسیک رفتار می‌نماید، که این با انتظارات فیزیکی ما سازگار است. به عبارت

با افزایش چگالی، افزایش و با افزایش دما، کاهش می‌یابد. همچنین دیده شد که هیچ نقطه مینیمی در نمودار انرژی آزاد وجود ندارد. این عدم وجود نقطه کمینه، بیانگر این است که مایع هلیوم-۳ دو بعدی دارای حالت مقیدی نیست. ما معادله حالت این سیستم را محاسبه کردیم و دریافتیم که با افزایش دما، معادله حالت سیستم سخت‌تر می‌شود. در واقع با افزایش چگالی، فشار سیستم افزایش می‌یابد و سیستم تراکم‌ناپذیرتر می‌شود. در نهایت، با محاسبه ظرفیت گرمایی در حجم ثابت دیدیم که در هر چگالی، ظرفیت گرمایی با افزایش دما افزایش می‌یابد تا اینکه در نهایت به مقدار حدی $1 k_B$ می‌رسد، یعنی در این حالت سیستم مانند یک گاز ایده‌آل دو بعدی کلاسیک رفتار می‌نماید. این نتیجه در دماهای تقریباً بالاتر از $3/5 K$ ، مستقل از چگالی است. با محاسبه تراکم‌ناپذیری برای مایع هلیوم-۳ دو بعدی نتیجه گرفته شد که این مشخصه سیستم، با افزایش دما و چگالی افزایش می‌یابد.

مراجع

- [1] A.D. Novaco, C.E. Campbell, Effects of crystalline substrate potentials on quasi-two-dimensional liquid helium, *Physical Review B* 11 (1975) 2525-2534.
- [2] B. Brami, F. Joly, C. Lhuillier, Is there a liquid phase in a (Sub) monolayer of ^3He adsorbed on graphite?, *Journal of Low Temperature Physics* 94 (1994) 63-76.
- [3] V. Grau, J. Boronat, J. Casulleras, Zero-temperature equation of state of two-dimensional ^3He , *Physical Review Letters* 89 (2002) 045301-045305.
- [4] D. Sato, D. Tsuji, S. Takayoshi, K. Obata, T. Matsui, H. Fukuyama, Evidence for a self-bound liquid state and the



شکل ۶. تراکم‌ناپذیری مایع هلیوم-۳ دو بعدی بر حسب چگالی در دماهای (T) مختلف.

نتیجه‌گیری

در این مقاله یک سیستم دو بعدی فرمیونی متشکل از اتم‌های هلیوم-۳ در دمای معین را در نظر گرفته و بعضی از خصوصیات ترمودینامیکی آن را با استفاده از روش بس‌ذره‌ای وردشی بر اساس بسط خوشه‌ای انرژی و به کمک پتانسیل لنارد-جونز محاسبه کردیم. در این محاسبات، جمله‌های اول و دوم بسط خوشه‌ای انرژی در نظر گرفته شد. نتایج محاسبات ما نشان داد که انرژی کل بر ذره مایع هلیوم-۳ دو بعدی با افزایش دما و چگالی افزایش می‌یابد. از نتایج خود مشاهده کردیم که آنتروپی سیستم با کاهش دما و افزایش چگالی، کاهش می‌یابد. این رفتار سیستم کاملاً با انتظارات فیزیکی ما از آنتروپی به‌عنوان معیاری از بی‌نظمی سیستم سازگار است. همان‌طور که می‌دانیم هرچه دما کاهش یا چگالی افزایش می‌یابد تعداد حالت‌های قابل دسترس سیستم کاهش می‌یابد و سیستم به سمت نظم بیشتر پیش می‌رود. به عبارتی آنتروپی سیستم کاهش می‌یابد. ما مشاهده نمودیم که انرژی آزاد مایع هلیوم-۳ دو بعدی

- [10] G.H. Bordbar, S. Mohsenipour, M.J. Karimi, LOCV Calculations for polarized liquid ${}^3\text{He}$: The effect of Three-Body Cluster Energy, *International Journal of Modern Physics B* 25 (2011) 2355-2363.
- [11] G.H. Bordbar, M. Karimi, Variational calculations for normal liquid ${}^3\text{He}$ at finite temperature using the spin-dependent correlation function, *International Journal of Modern Physics B* 25 (2011) 4359-4368.
- [12] G.H. Bordbar, S. Hoseini, Isentropic calculations for normal liquid ${}^3\text{He}$ using the lowest order constrained variational method, *Iranian Journal of Science & Technology A* 36 (2012) 225-230.
- [13] G. H. Bordbar, F. Fatemi, M.T. Mohammadi Sabet, Lowest-order constrained variational calculations for two-dimensional liquid ${}^3\text{He}$, *Journal of Theoretical and Computational Chemistry* 12 (2013) 1350011-1350072.
- [14] A.L. Fetter, J.D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle systems, McGraw-Hill, New York (1971).
- commensurate-incommensurate coexistence in 2D ${}^3\text{He}$ on graphite, *Journal of Low Temperature Physics* 158 (2010) 201-206.
- [5] D. Sato, K. Naruse, T. Matsui, H. Fukuyama, Observation of self-binding in monolayer ${}^3\text{He}$, *Physical Review Letters* 109 (2012) 235306-235310.
- [6] S.W. Van Sciver, O.E. Vilches, Heat-capacity study of second layer of ${}^3\text{He}$ adsorbed on Grafoil, *Physical Review B* 18 (1978) 285-292.
- [7] S.W. Van Sciver, Heat capacity of multilayer ${}^3\text{He}$ adsorbed on graphite, *Physical Review B* 18 (1978) 277-284.
- [8] G.H. Bordbar, M.J. Karimi, J. Vahedi, Lowest order constrained variational calculation for polarized liquid ${}^3\text{He}$ at finite temperature, *International Journal of Modern Physics B* 23 (2009) 113-123.
- [9] G.H. Bordbar, M. Karimi, A. Poostforush, Spin-spin correlation effect on the thermodynamic properties of the polarized liquid ${}^3\text{He}$ at finite temperature, *European Physical Journal B* 73 (2010) 85-94.