

مطالعه وابستگی تغییرات فشار مخلوط $D-^3\text{He}$ به غلظتهای نسبی هلیوم با استفاده از پتانسیل exp-6

سید محمد متولی - محمدرضا پهلوانی - مقداد گیلانی*

دانشگاه مازندران، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک هسته ای

چکیده:

دوتریوم و هلیوم-۳ برهمکنشهای جاذبه ای و دافعه ای پیچیده ای دارند، بنابراین نیروهای بین مولکولهای غیر متشابه در این مخلوط نقش مهمی در تعیین خواص آن ایفا می کند. همچنین جرم سبک این دو عنصر موجب می شود که اثرات کوانتومی بویژه در دماهای پایین اهمیت پیدا کند. در این مقاله، فشار را در مخلوط دوتریوم و هلیوم-۳ با استفاده از پتانسیل exp-6 و نظریه اختلال آماری در دماها و غلظتهای نسبی هلیوم مختلف محاسبه نموده ایم. نتایج حاصل از محاسبات نشان می دهد، با افزایش غلظت نسبی هلیوم-۳ در یک دمای ثابت در مخلوط اشاره شده فشار کاهش می یابد.

کلمات کلیدی: پتانسیل exp-6، نظریه اختلال آماری، غلظت نسبی هلیوم-۳.

مقدمه:

کمیتهای ترمودینامیکی در فشار و درجه حرارتهای بالا در بخشهای مختلف فیزیک از جمله همجوشی هسته ای بسیار با اهمیت است. از آنجائیکه امکان اندازه گیری عملی در فشارهای بالا به دلیل شرایط نامطلوب محیط وجود ندارد، مباحث نظری که اثرات فشار و دما در آن لحاظ شده باشد مورد توجه پژوهشگران می باشد. اخیرا مطالعات مختلفی در مورد اثرات دما و فشار روی خواص مخلوط مایع هیدروژن و هلیوم-۳ بر پایه تئوری اختلال آماری [۱] صورت گرفته است. این بررسیها معمولا بر پایه پتانسیل هایی انجام شده که شامل یک جمله دافعه کوتاه برد و یک جمله جاذبه بلند برد بوده اند. پتانسیل دافعه ای کوتاه برد به عنوان مرجع غیر اختلالی مخلوط کروی سخت است که از طریق پتانسیل جاذبه ای بلند برد که به عنوان اختلال مرتبه اول در نظر گرفته می شود بهبود می یابد. پتانسیلهای مختلفی در مطالعات مورد استفاده قرار گرفته اند از جمله پتانسیل مربعی، پتانسیل دو بل یوکاوا و غیره. پتانسیل دو بل یوکاوا پتانسیل مفیدی است و عبارات تحلیلی خوبی برای انرژی آزاد هلمهولتز و خصوصیات ترمودینامیکی سیستم ارائه می دهد، اما به نظر می رسد پتانسیلهای با یک دافعه نرم مانند پتانسیل exp-6 [۲] واقعیتر از پتانسیل دو بل یوکاوا بوده و نتایج بهتری را بدهد. بنابراین ما در اینجا با استفاده از پتانسیل exp-6، انرژی آزاد هلمهولتز و سپس فشار را برای مخلوط دوتریوم-هلیوم بدست می آوریم. دوتریوم و هلیوم-۳ عناصر سبکی هستند، بنابراین اثرات کوانتومی از طریق تصحیحات کوانتومی مرتبه اول در چارچوب بسط ویگنر- کریکوود تاثیر گذار خواهند بود [۳و۴].

روش کار:

انرژی آزاد گیبس و انرژی آزاد هلمهولتز عباراتی مناسب برای بیان پارامترهای دیگر ترمودینامیکی سیستم هستند و نقش حیاتی در تعیین پایداری در فاز ترمودینامیکی یک مخلوط دوگانه ایفا می کنند. معادله زیر رابطه بین انرژی آزاد گیبس و انرژی آزاد هلمهولتز را بیان می کند:

$$\frac{G}{NKT} = \frac{F}{NKT} + \frac{P}{NKT} \quad (1)$$

که در آن F بیانگر انرژی آزاد هلمهولتز و ρ نیز معرف چگالی است. انرژی آزاد هلمهولتز یک مخلوط شامل جملات مختلفی است که به علت خاصیت جمع پذیری آن می توان این فاکتورها را با هم جمع کرد و به صورت رابطه زیر بیان نمود:

$$\frac{F}{N} = F^{id} + F^{HB} + F^t + F^Q \quad (2)$$

F^{id} جمله ناشی از مخلوط گازی ایده ال می باشد و از طریق رابطه زیر بیان می شود:

$$\beta F^{id} = \frac{v}{\gamma} \ln \left(\frac{h^v}{v \pi M K T} \right) + \ln \rho + \sum_{i=1}^v c_i \ln c_i - 1 \quad (3)$$

c_i ها در رابطه بالا معرف کسر مولی اجزای مخلوط دوتریوم و هلیوم-۳ می باشند.

F^{HCB} انرژی آزاد هلمهولتز مخلوط برای سهم پوسته سخت است که شامل دو جمله زیر می باشد:

$$F^{HCB} = a_{mix}(F^{HS} + \Delta F^{HS}) \quad (4)$$

که F^{HS} جمله ناشی از مخلوط کروی سخت و a_{mix} فاکتور ناشی از غیر کروی بودن مولکول [۵] و ΔF^{HS} جمله ای است که به خاطر جمع ناپذیری سایز (شعاع کروی سخت) و انرژی افزوده شده است [۶] F^{HS} از رابطه زیر بدست می آید:

$$\beta F^{HS} = \frac{v}{\pi \rho} \left[\frac{\eta_r \eta_r}{(1-\eta_r)} + \frac{\eta_r^v}{\eta_r(1-\eta_r)^v} + \left(\frac{\eta_r^v}{\eta_r} - \eta_r \right) \ln(1 - \eta_r) \right] \quad (5)$$

که η_i ها از رابطه زیر بدست می آیند:

$$\eta_i = \frac{\rho \pi}{v} \sum_1 c_i (\sigma_{ii})^i \quad (6)$$

در رابطه فوق بیانگر شعاع کروی سخت می باشد و جمله اختلالی مرتبه اول ناشی از جاذبه بلند برد به صورت زیر محاسبه می شود:

$$F^t = v \pi \rho \sum_{i,j} c_i c_j \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} u_{ij}(r) g_{ij}(r) V_{ij} r^v dr \quad (7)$$

که پتانسیل موجود در این رابطه پتانسیل \exp^{-6} و $g_{ij}(r)$ بیانگر تابع توزیع [۷-۹] می باشد. هلیوم یک مولکول تک اتمی است حال آنکه دوتریوم مولکول دو اتمی و غیر کروی است، بنابراین در انتگرال بالا یک فاکتور حجمی (V_{ij}) برای حجم میانگین مولکولی افزوده شده است.

$$V_{ij} = 1 + (n_i - 1) \left[\frac{3L_i}{2} \left(1 + \frac{(\sigma_{jj})^2}{(\sigma_{ii})^2} \right) - \frac{L_i^2}{3} - 3H_{ij}\theta_{ij} \left(\frac{\sigma_{jj}}{\sigma_{ii}} \right)^2 \right]$$

$$L_i = \frac{l_i}{\sigma_{ii}} \quad (8)$$

$$\theta_{ij} = \sin^{-1} \left(\frac{l_i}{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}} \right)$$

$$H_{ij} = \frac{1}{2\sigma_{ii}} \left((\sigma_{ii} + \sigma_{jj})^2 - l_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

که در این رابطه n_i تعداد عناصر کروی برای هر مولکول، d_{ii} شعاع موثر کروی سخت و l_i فاصله مرکز تا مرکز یا همان طول پیوند می باشد. جمله آخر در معادله (۲) تصحیح کوانتومی مرتبه اول برای انرژی آزاد هلمهولتز است که با استفاده از بسط ویگنر- کریکوود از رابطه زیر بدست می آید:

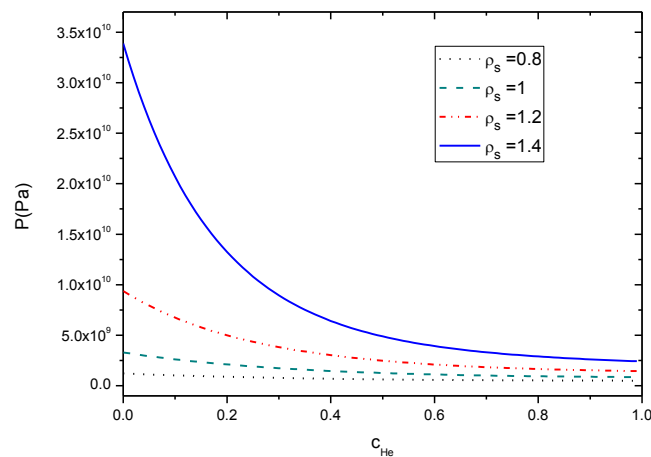
$$F^Q = \frac{h^3 \beta N \rho S}{24\pi} \sum_{i,j} \frac{c_i c_j}{m_{ij}} \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} \nabla^2 u_{ij}(r) g_{ij}(r) V_{ij} r^2 dr \quad (9)$$

با محاسبه انرژی آزاد هلمهولتز و از طریق رابطه ترمودینامیکی زیر، فشار مخلوط دوتریوم و هلیوم-۳ را بدست می آوریم.

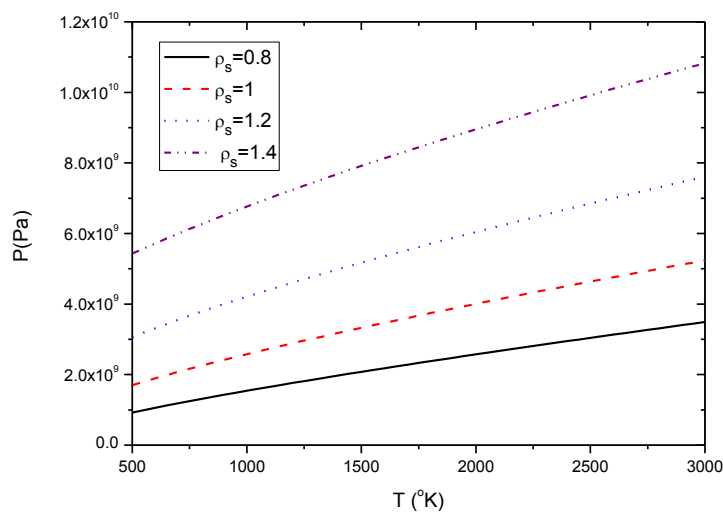
$$P = \frac{\rho}{N} \left(\frac{\partial F}{\partial \rho} \right) \quad (10)$$

از رابطه فوق چنین بر می آید که فشار خاصیت جمع پذیری دارد و جملات مربوط به بخشهای مختلف فشار را می توان از انرژی آزاد هلمهولتز بدست آورد. با حل عددی معادلات اشاره شده مقادیر فشار بر حسب کسر مولی هلیوم-۳ در یک دمای معین برای مقادیر مختلف چگالی محاسبه شده و نتایج آن در شکل (۱) نشان داده شده است. در شکل (۲) نمودار فشار بر حسب دما در چگالیهای مختلف و در یک کسر مولی هلیوم-۳ ثابت رسم شده است. همانگونه که در شکل (۱) ملاحظه می شود با افزایش غلظت نسبی هلیوم-۳ در مخلوط دوتریوم و هلیوم-۳، فشار کاهش می یابد که این کاهش فشار در غلظتهای نسبی بالای ۰/۵ محسوس تر است. نتایج حاصل از محاسباتمان در شکل (۲) نشان می دهد که با افزایش دمای مخلوط، فشار افزایش می یابد و همچنین در یک دمای ثابت با افزایش چگالی، فشار افزایش می یابد. شکل (۳) نیز تغییرات فشار بر حسب دما و چگالی کاهش یافته را نشان می دهد. در ادامه با استفاده از این محاسبات مقادیر فشار را

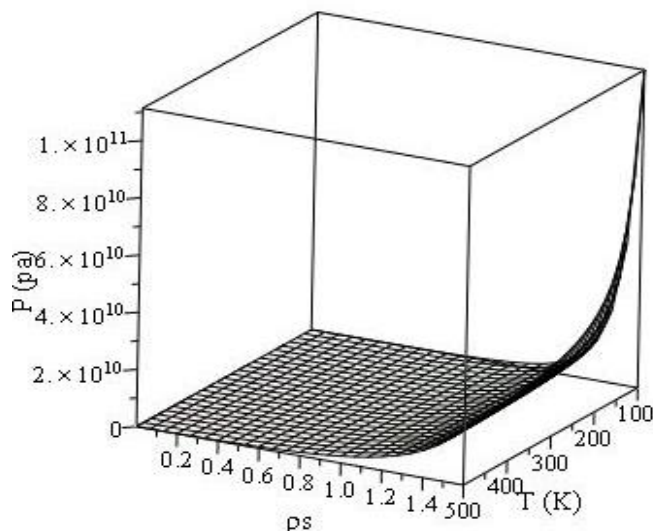
برای مخلوط هیدروژن و هلیوم-۳ محاسبه و با مقادیر شبیه سازی شده مونت کارلو مورد مقایسه قرار داده و نتایج حاصل را در جدول (۱) آورده ایم. همانطور که ملاحظه می شود مقادیر محاسبه شده برای فشار در مخلوط هیدروژن و هلیوم-۳ در توافق خوبی با مقادیر شبیه سازی مونت کارلو [۱۰] می باشد.



شکل شماره (۱): فشار بر حسب کسر مولی هلیوم در چگالیهای مختلف دوتریوم و هلیوم-۳ و در دمای ثابت $T=300\text{ K}$



شکل شماره (۲): نمودار فشار بر حسب دما در چگالیهای مختلف دوتریوم و هلیوم-۳ و در کسر مولی ثابت $c_{He}=0,5$



شکل شماره (۳): نمودار سه بعدی فشار مخلوط بر حسب دما و چگالی

جدول شماره (۱): مقایسه فشار محاسبه شده برای مخلوط هیدروژن و هلیوم-۳ در این مطالعه با مقادیر شبیه سازی شده مونت کارلو و همچنین مقادیر فشار برای مخلوط دوتریوم و هلیوم-۳.

T(K)	C _{He}	ρ_s	η	$P_{MC}(H\text{-}^3\text{He})$ (Gpa) [۱۰]	$P(H\text{-}^3\text{He})$ (Gpa) [۱۱]	$P(D\text{-}^3\text{He})$ (Gpa)
۳۰۰	۰,۲۵	۱,۱۰۱	۰,۴۳۳	۲,۳۰۹۰	۲,۷۰۳۹	۲,۸۸۸۵
۳۰۰	۰,۵	۱,۱۰۱	۰,۴۰۰	۱,۸۵۶۰	۱,۷۰۰۱	۱,۷۸۰۲
۳۰۰	۰,۷۵	۱,۱۰۱	۰,۳۶۷	۱,۴۲۴۰	۱,۲۸۱۶	۱,۳۰۷۲
۱۰۰۰	۰,۵	۱,۲۲۳	۰,۳۳۵	۴,۵۱۰۰	۴,۴۲۰۵	۴,۴۴۶۸
۱۰۰۰	۰,۷۵	۱,۲۲۳	۰,۳۰۷	۳,۷۱۵۰	۳,۵۱۹۰	۳,۵۳۳۹
۴۰۰۰	۰,۵	۱,۳۷۶	۰,۲۴۷	۱۲,۴۳۰۰	۱۲,۰۸۳۲	۱۲,۰۶۶۷
۴۰۰۰	۰,۵	۱,۵۷۲	۰,۲۸۲	۱۶,۳۳۰۰	۱۶,۴۴۸۵	۱۶,۴۰۳۶

بحث و نتیجه گیری:

در این کار تحقیقاتی، فشار را در مخلوط دوتریوم و هلیوم-۳ با استفاده از پتانسیل exp-۶ و نظریه اختلال آماری در دماها و غلظتهای نسبی هلیوم مختلف محاسبه نموده ایم. از آنجایی که مقادیر شبیه سازی شده برای این مخلوط در دسترس نمی باشد، برای اطمینان از صحت و دقت محاسبات ابتدا فشار را برای مخلوط

هیدروژن و هلیوم-۳ تعیین و با مقادیر شبیه سازی مونت کارلو مورد مقایسه قرار داده ایم. نتایج حاصل از محاسبات در توافق خوبی با مقادیر شبیه سازی مونت کارلو بوده و همچنین با افزایش غلظت نسبی هلیوم-۳ در یک دمای ثابت در مخلوطهای اشاره شده فشار کاهش می یابد.

مراجع:

- [۱] P. J. Leonard, D. Henderson and J. A. Barker, *Mol. Phys.* ۲۱, ۱۰۷ (۱۹۷۱).
- [۲] J. Sun, *et al.*, *Chem. Phys. Lett.* ۷۲, ۴۴۹ (۲۰۰۷).
- [۳] E. P. Wigner, *Phys. Rev.* ۴۰, ۷۴۹ (۱۹۳۲).
- [۴] J. G. Kirkwood, *Phys. Rev.* ۴۴, ۳۱ (۱۹۳۳).
- [۵] C. Barrio and J. R. Solana, *J. Chem. Phys.* ۱۱۳, ۱۰۱۸۰ (۲۰۰۰).
- [۶] S. M. Osman and R. N. Singh, *Mol. Phys.* ۹۶, ۸۷ (۱۹۹۹).
- [۷] P. Paricaud, *J. Chem. Phys.* ۱۲۴, ۱۵۴۵۰۵ (۲۰۰۶).
- [۸] S. M. Motevalli, M. R. Pahlavani and M. Azimi, *Pro. ۳rd International Conference on Science & Technology: Applications in Industry & Education*, ۲۹ (۲۰۱۰).
- [۹] Xian-Zhi Wang, Hong- Ru Ma, *J. Chem. Phys.* ۲۳, ۶۷۵ (۲۰۱۰).
- [۱۰] F. H. Ree, *J. Chem. Phys.* ۷۸, ۴۰۹ (۱۹۸۳).
- [۱۱] S. M. Motevalli, M. R. Pahlavani and M. Azimi, *Int. J. Mod. Phys. B* ۲۶, ۱۲۵۰۱۰۳ (۲۰۱۲).