

بررسی فرایند شکافت خوشه‌های تغییر شکل یافته سدیم در الگوی قطره مایع و ژله پایدار

محمود پیامی و بنین شاکری

گروه فیزیک، پژوهشکده علوم هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران

(دریافت مقاله: ۱۳۸۷/۱۱/۱۵؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۸۷/۴/۵)

چکیده

در این مقاله، ما با استفاده از مدل قطره مایع در چار چوب الگوی ژله پایدار به مطالعه فرایند شکافت خوشه‌های اتمی باردار Na پرداخته ایم. در این بررسی، هندسه خوشه، غیر کروی در نظر گرفته شده است. انرژی خوشه‌ها، اندازه بحرانی، ارتفاع سد شکافت و انرژی تبخیر محاسبه شده‌اند. نتایج به دست آمده نشان دهنده بهبود نتایج قبلی و توافق بهتر با تجربه می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: مدل قطره مایع، الگوی ژله پایدار، شکافت، اندازه بحرانی، انرژی تبخیر

۱. مقدمه

فیزیک خوشه‌ها، حوزه‌ای از دانش است که ماهیتاً بین رشته‌ای است. برای درک پدیده‌هایی که در خوشه‌های اتمی اتفاق می‌افتد، لازم است که جنبه‌هایی از فیزیک اتمی و مولکولی و همچنین فیزیک ماده چگال و شیمی فیزیک را بدانیم. علاوه بر این معلوم شده است که اکثر پدیده‌هایی که در هسته اتمها وجود دارند، به طور مشابه در خوشه‌های اتمی نیز مشاهده می‌شوند. به عنوان مثال می‌توان از اثرات پوسته‌ای، برانگیختگی دسته جمعی، شکافت و فرایندهای پراکندگی نام برد. بنابراین عجیب نخواهد بود اگر در توصیف خوشه‌های اتمی از مفاهیمی که در ابتدا در فیزیک هسته‌ای به کار گرفته شده‌اند، استفاده شود.

در این مقاله، ما می‌خواهیم با استفاده از الگوی قطره مایع [۱] و الگوی ژله پایدار [۲]، فرایند شکافت خوشه‌های فلزی سدیم را مورد بررسی قرار دهیم. در این بررسی، اندازه بحرانی، ارتفاع سد شکافت، E_f ، انرژی تبخیر، E_e ، و اندازه

بحرانی تبخیر، N_{eva}^{2+} خوشه‌های فلزی سدیم محاسبه و نتایج به دست آمده با کار دیگران [۳] و با کار قبلی که بر اساس هندسه کروی انجام شده بود [۴]، مقایسه شده است. همچنین، نشان داده شده است که نتایج به دست آمده در این مقاله به نتایج تجربی نزدیکتر است [۵ و ۶].

۲. جزئیات محاسبات

بر اساس مدل قطره مایع، انرژی خوشه چند اتمی به صورت زیر داده می‌شود [۷]:

$$E = E_{bulk} + E_s + E_{cur} = \alpha V + \sigma A + \frac{1}{4} \gamma k^{-1} dA, \quad (1)$$

که در آن α ، σ و γ به ترتیب انرژیهای حجمی، سطحی و انحنا بوده و V ، A به ترتیب حجم و مساحت سطح قطره می‌باشند. انحناى موضعی سطح قطره، k ، به صورت

$$k = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (2)$$

تعریف می‌شود. محاسبه ضرایب α ، σ و γ به طرق

$$E_{cur} = \frac{1}{\gamma} \int k^{-1} dA$$

$$= \frac{1}{\gamma} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} k^{-1} \sqrt{1 + \left(\frac{1}{R_d} \frac{dR_d}{d\theta}\right)^2} R_d^2 \sin\theta d\theta \quad (8)$$

$$= 2\pi \gamma r_0 N^{1/2} \left(1 + \frac{2}{5} \alpha_p^2 + \frac{16}{105} \alpha_p^3 - \frac{8}{175} \alpha_p^4\right).$$

بنابراین انرژی کل خوشه N اتمی خنثی برابر است با:

$$E = \varepsilon N + \varepsilon \pi r_0^2 N^{1/2} B_s + \frac{1}{\gamma} \pi r_0^2 N^{1/2} B_{cur}, \quad (9)$$

که در آن B_s و B_{cur} با توجه به معادلات (۵) و (۶) به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$B_s = 1 + \frac{2}{5} \alpha_p^2 - \frac{4}{105} \alpha_p^3 - \frac{38}{175} \alpha_p^4, \quad (10)$$

$$B_{cur} = 1 + \frac{2}{5} \alpha_p^2 + \frac{16}{105} \alpha_p^3 - \frac{26}{175} \alpha_p^4.$$

۲.۲. انرژی خوشه‌های N اتمی تغییر شکل یافته با بار اضافی Z

برای محاسبه انرژی کولنی خوشه فلزی با بار اضافی Z، انرژی الکترواستاتیکی کره تغییر شکل یافته را با حل معادله پواسون و اعمال شرط مرزی دریشه به دست می‌آوریم. نتیجه به صورت زیر در می‌آید:

$$E_c = \frac{Z^2 e^2}{2r_0} N^{-1/2} \left(1 - \frac{1}{5} \alpha_p^2 - \frac{4}{105} \alpha_p^3 + \frac{53}{245} \alpha_p^4\right). \quad (11)$$

با استفاده از این رابطه و روابط قبل می‌توان به بررسی فرایند شکافت خوشه باردار پرداخت.

۳.۲. فرایند شکافت و تبخیر

انرژی کل خوشه N اتمی با بار اضافی Z برابر است با:

$$E = E_b + E_s + E_{cur} + E_c \quad (12)$$

E_b ، E_s و E_{cur} به ترتیب انرژیهای حجمی، سطحی و انحنا هستند که در بخش قبل محاسبه شده‌اند.

انرژی تغییر شکل خوشه تا مرتبه دوم α_p به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Delta E = \frac{1}{5} \alpha_p^2 [2E_s + 2E_{cur} - E_c], \quad (13)$$

که در آن E_s ، E_{cur} و E_c به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$E_s = \varepsilon \pi r_0^2 N^{1/2} \sigma = \varepsilon_s N^{1/2},$$

$$E_{cur} = \frac{1}{\gamma} \pi r_0^2 N^{1/2} \varepsilon_{cur} = \varepsilon_{cur} N^{1/2}, \quad (14)$$

$$E_c = \frac{Z^2 e^2}{2r_0} N^{-1/2} = Z^2 \varepsilon_c N^{-1/2}.$$

گونگون صورت پذیرفته است [۷و۴]. در یک روش متداول [۴]، ابتدا انرژی حالت پایه کوانتومی خوشه N اتمی ($N=2, 8, 18, 20, 34, 40, \dots$) با حل معادلات خود سازگار

کوهن-شم [۸] در چارچوب نظریه تابعی چگالی [۹] حل شده است و سپس مقادیر انرژی به دست آمده به رابطه

$$E = \alpha_v N + \alpha_s N^{1/2} + \alpha_{cur} N^{1/2}, \quad (3)$$

برازش می‌شود که در آن برای هندسه کروی داریم:

$$\alpha_v = \frac{\alpha}{n}, \quad \alpha_s = \varepsilon \pi r_0^2 \sigma, \quad \alpha_{cur} = \frac{1}{\gamma} \varepsilon \pi r_0^2 \gamma \quad (4)$$

اعداد ۲، ۸، ۱۸، ۲۰، ۳۴، ... به اعداد جادویی معروفند که به ازای آنها پوسته‌های انرژی، کامل می‌شوند.

مقادیر حاصل از برازش انرژی خود سازگار خوشه‌های سدیم در الگوی زله پایدار برای ضرایب ε ، α_v و σ به ترتیب $257eV/6$ ، $3/069 meV/bohr$ و $10/35 meV/bohr$ به دست می‌آید [۴].

۲.۱. انرژی خوشه‌های N اتمی خنثی تغییر شکل یافته

برای توصیف هندسه خوشه‌های غیر کروی، از تغییر شکل چهار قطبی، که به صورت زیر بیان می‌شود [۳]، استفاده می‌کنیم:

$$R_d = R_0 [1 + \alpha_0 P_0(\cos\theta) + \alpha_2 P_2(\cos\theta)], \quad (5)$$

که در آن R_d ، مختص شعاعی کره تغییر شکل یافته و R_0 شعاع کره هم حجم با خوشه تغییر شکل یافته است. P_0 و P_2 به ترتیب چند جمله‌ایهای لژاندر مرتبه صفر و دوم می‌باشند. ضریب α_0 ، از اعمال شرط ثابت بودن حجم خوشه به دست آمده و به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\alpha_0 = -\frac{\alpha_2^2}{5} - \frac{2\alpha_2^3}{105}. \quad (6)$$

با این شرط، حجم خوشه تغییر شکل یافته با دقتی تا مرتبه چهارم α_p ، برابر با حجم خوشه کروی با شعاع R_0 است. با داشتن R_d انرژیهای سطحی و انحنا به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$E_s = \sigma \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \sqrt{1 + \left(\frac{1}{R_d} \frac{dR_d}{d\theta}\right)^2} R_d^2 \sin\theta d\theta d\phi \quad (7)$$

$$= \varepsilon \pi r_0^2 N^{1/2} \sigma \left(1 + \frac{2}{5} \alpha_2^2 - \frac{4}{105} \alpha_2^3 - \frac{38}{175} \alpha_2^4\right),$$

اگر $\chi < 1$ باشد، خوشه در مقابل شکافت خودبه خودی پایدار است.

اگر $\chi > 1$ باشد، خوشه در مقابل شکافت خودبه خودی ناپایدار است.

در بررسی شکافت خوشه‌های باردار معمولاً ناحیه $0 \leq \chi \leq 1$ مورد توجه قرار می‌گیرد.

در حد $\chi \ll 1$ ، تغییر انرژی ناشی از تغییر شکل خوشه کروی باردار برابر است با [۳]:

$$\Delta E = \varepsilon_{s_0} N^{2/3} [0/40(1-\chi)\alpha_4^2 - (0/0381 + 0/0762\chi)\alpha_4^2 - (0/217 - 0/423\chi)\alpha_4^2] \quad (21)$$

با استفاده از رابطه فوق ارتفاع سد شکافت عبارت است از:

$$E_f = \varepsilon_{s_0} N^{2/3} f(\chi), \quad (22)$$

$$f(\chi) = \frac{98}{135} (1-\chi)^3.$$

در حد $\chi \ll 1$ ، ارتفاع سد شکافت به صورت زیر محاسبه می‌شود [۳ و ۱۰]:

$$E_f = \varepsilon_{s_0} N^{2/3} f(\chi), \quad (23)$$

$$f(\chi) = 0/2599 - 0/1983\chi.$$

برای محاسبه ارتفاع سد شکافت برای مقادیر مابین این دو حد، با به کار بردن روش درونیابی اسویاتکی [۱۱]، ارتفاع سد شکافت برای $\chi < 0/6$ برابر است با:

$$E_f = \varepsilon_{s_0} N^{2/3} f(\chi), \quad (24)$$

$$f(\chi) = 0/2599 - 0/1983\chi - 0/5369\chi^2 + 0/457\chi^3,$$

و ارتفاع سد شکافت برای $\chi > 0/6$ نیز عبارت است از:

$$E_f = \varepsilon_{s_0} N^{2/3} f(\chi), \quad (25)$$

$$f(\chi) = (1-\chi)^2 [0/7259 - 0/3302(1-\chi) + 0/6387(1-\chi)^2 + 7/8727(1-\chi)^3 + 12/0061(1-\chi)^4].$$

فرایند دیگری که در خوشه‌های اتمی اتفاق می‌افتد و با فرایند شکافت در رقابت است، فرایند تبخیر است. غالب فرایندهای تبخیر در خوشه‌های اتمی در مجرای تک اتمی بوده [۴] و به صورت زیر نشان داده می‌شود:

$$M_N^Z \rightarrow M_{N-1}^Z + M_1 \quad (26)$$

انرژی تبخیر برابر است با:

از آنجایی که انرژی‌های سطحی و انحنا، با علامت مثبت ظاهر شده‌اند و انرژی کولنی دارای علامت منفی می‌باشد، پایداری خوشه در مقابل شکافت خود به خودی با منفی و یا مثبت بودن ΔE تعیین می‌شود.

حالت‌های مختلف ΔE عبارت است از:

۱. اگر $\Delta E > 0$ باشد، در این صورت با استفاده از رابطه (۱۳)

می‌توان به این نتیجه رسید که:

$$E_{c_0} < 2E_{s_0} + 2E_{cur_0}, \quad (15)$$

تحت این شرایط خوشه در مقابل شکافت پایدار است.

۲. اگر $\Delta E < 0$ باشد، در این صورت با استفاده از رابطه (۱۳)

می‌توان به این نتیجه رسید که:

$$E_{c_0} > 2E_{s_0} + 2E_{cur_0}, \quad (16)$$

تحت این شرایط خوشه در مقابل شکافت خود به خودی ناپایدار است.

۳. اگر $\Delta E = 0$ باشد، در این حالت براساس معادله (۱۳)،

خواهیم داشت:

$$E_{c_0} = 2E_{s_0} + 2E_{cur_0}, \quad (17)$$

$$Z^2 \varepsilon_{c_0} N^{-1/3} = 2\varepsilon_{s_0} N^{2/3} + 2\varepsilon_{cur_0} N^{1/3}.$$

N و Z که در معادله (۱۷) صدق کند، N_c بحرانی و Z_c بحرانی هستند که خوشه در مقابل شکافت خود به خودی ناپایدار است.

اگر از انرژی انحنا در مقابل جملات سطحی و حجمی

چشم پوشی کنیم، معادله (۱۳) به صورت زیر در می‌آید:

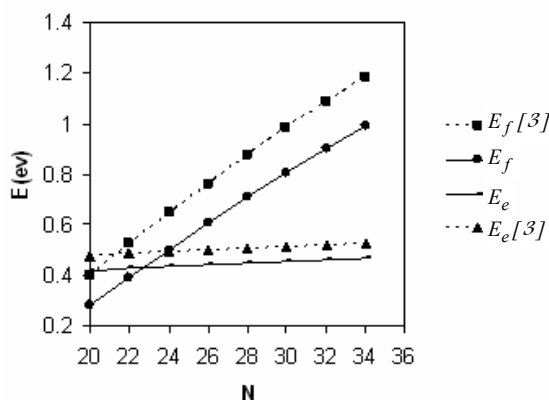
$$2E_{s_0} = E_{c_0} \quad (18)$$

با استفاده از رابطه فوق، اندازه بحرانی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

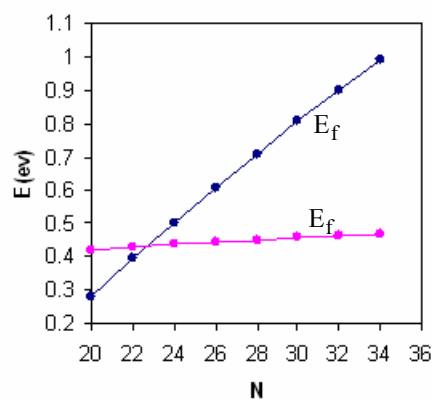
$$\left[\frac{Z^2}{N} \right]_c = \frac{2\varepsilon_{s_0}}{\varepsilon_{c_0}} = 12 \left(\frac{4\pi r_0^2}{3} \right) \frac{\sigma}{e^2}. \quad (19)$$

پارامتر شکافت پذیری، χ ، نیز کمیت مهمی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\chi = \frac{\left(\frac{Z^2}{N} \right)}{\left(\frac{Z^2}{N} \right)_c}. \quad (20)$$



شکل ۲. مقایسه انرژی شکافت و تبخیر خوشه‌های اتمی Na به دو روش SJM و JM [۳].



شکل ۱. ارتفاع سد شکافت E_f و انرژی تبخیر E_e محاسبه شده با الگوی ژله‌ای پایدا برای خوشه‌های Na^{2+} .

جدول ۱. اندازه بحرانی خوشه سدیم با $r_c = 3/99 \text{ bohr}$.

element	N_c^{2+}	(بدون انرژی انحنا) N_c^{2+}	N_c^{2+}	N_c^{2+}
Na	۱۰	۱۲	۱۰ [۳]	۸ [۴]

نتایج محاسبات برای N های مختلف عنصر Na^{2+} به همراه انرژی تبخیر خوشه اتمی Na^{2+} (بدون در نظر گرفتن انرژی انحنا)، در نمودار ۱ نشان داده شده است.

همچنین برای مقایسه نتایج مان و نتایج محاسبات مرجع [۳] با الگوی ژله ساده، منحنی انرژی Na^{2+} حاصل از این دو روش در نمودار ۲ ارائه شده است.

در خاتمه، با توجه به نمودار شکل ۱، اندازه بحرانی تبخیر خوشه سدیم (محل تلاقی دو نمودار E_e و E_f)، برابر $N_{eva}^{2+} = 24$ به دست می‌آید، که در مقایسه با نتایج کار قبلی [۴] ($N_{eva}^{2+} = 20$)، توافق بهتری با نتایج تجربی ($N_{eva}^{2+} = 25$) [۵] و ($N_{eva}^{2+} = 27$) [۶] دارد. بنابراین، در نظر گرفتن هندسه غیر کروی برای توافق نتایج محاسبات و تجربه از اهمیت زیادی برخوردار است.

۴. نتیجه‌گیری

ما با استفاده از مدل قطره مایع و الگوی ژله پایدار، در چارچوب هندسه غیر کروی به بررسی خوشه‌های دو بار یونیده سدیم با اندازه‌های مختلف پرداخته‌ایم. در این بررسی، اندازه بحرانی خوشه‌ها جهت شکافت، ارتفاع سد شکافت، انرژی تبخیر و اندازه بحرانی تبخیر محاسبه شده و نتایج حاصل نشان می‌دهد که اگر تغییر شکل به حساب آید، توافق بهتری با نتایج تجربی حاصل خواهد شد.

N خاصی که در آن فرایند تبخیر بر فرایند شکافت غلبه می‌کند، انرژی تبخیر بحرانی، N_{eva}^{Z+} ، نامیده می‌شود.

۳. نتایج محاسبات و بحث

ما با حل معادله (۱۷) برای خوشه‌های N اتمی سدیم با $Z = 2$ ، اندازه بحرانی، N_c^{Z+} ، که به ازای آن خوشه در مقابل شکافت خود به خودی ناپایدار است، را محاسبه نموده و حاصل را با نتایج کار دیگران در جدول ۱ مقایسه کرده‌ایم.

مقدار $\left[\frac{Z^2}{N}\right]_c$ برای عنصر سدیم با استفاده از ضرایب محاسبه شده در الگوی ژله پایدار برابر 0.36 به دست آمده که توافق خوبی با نتیجه کار دیگران [۳] (0.39) دارد. جهت محاسبه ارتفاع سد شکافت خوشه‌های اتمی Na^{2+} ، از ضرایب محاسبه شده در الگوی ژله پایدار استفاده کرده و

سپاسگزاری

مؤلفین از حمایت بی دریغ معاونت تحقیقات و فناوری سازمان انرژی اتمی ایران تشکر و قدردانی می‌نمایند..

مراجع

- 231.
7. C Fiolhais and J P Perdew, *Phys. Rev. B* **45** (1992) 6207.
8. W Kohn and L J Sham, *Phys. Rev.* **140** (1965) A1133.
9. P Hohenberg and W Kohn, *Phys. Rev. B* **136** (1964) 864.
10. N Bohr and J A Wheeler, *Phys. Rev.* **57** (1939) 426.
11. W J Swiatecki, *Phys. Rev.* **104** (1956) 933.
1. W D Myers and W J Swiatecki, *Ann. Phys.* **55** (1969) 395.
2. J P Perdew, H Q Tran, and E D Smith, *Phys. Rev. B* **42** (1990) 11627.
3. W A Saunders, *Phys. Rev. A* **46** (1992) 7028.
4. M Payami, *Phys. Stat. sol.(b)* **241** (2004) 1838.
5. U Näher, S Bjørnholm, S Frauendorf, F Garcias, and C Guet, *Phys. Rep.* **285** (1997) 245.
6. A Vieira and C Fiolhais, *Phys. Lett. A* **220** (1996)