

Representation of the Thermodynamic Properties of Helium through a Temperature-Dependent Effective Potential

Dr. Ghyas Yassin* 

(Received 10 / 11 / 2025. Accepted 25 / 1 / 2026)

□ ABSTRACT □

This work presents a theoretical study of the thermodynamic properties of pure helium within the framework of statistical mechanics, based on an extended lattice gas model. In this approach, particles are represented on a regular lattice with single-site occupancy and short-range pairwise interactions, providing a simplified description of weakly interacting systems. The conventional lattice gas model is extended by introducing a temperature-dependent effective potential, which is extracted directly from high-precision experimental data of the second virial coefficient $B(T)$ of helium. This procedure allows the effective incorporation of quantum correction effects into a classical statistical framework without altering the fundamental mathematical structure of the model.

The theoretical results are compared with reference data reported in the NIST database, and good agreement is obtained over a wide temperature range, particularly the intermediate and low-temperature regimes. In addition, the behavior of pressure, internal energy, isothermal compressibility, and correlation length is analyzed. The results reveal the emergence of quasi-critical behavior in the attractive interaction regime and the formation of a periodic lattice ordering in the repulsive regime at low temperatures.


These findings demonstrate that the extended lattice gas model, when experimentally calibrated through the second virial coefficient, constitutes an effective tool for interpreting the macroscopic thermodynamic properties of helium from a well-defined microscopic perspective.

Keywords: helium, thermodynamics, lattice gas model, effective potential, second virial coefficient, thermal properties.

Copyright  :Latakia University Journal (Formerly Tishreen) -Syria, The authors retain the copyright under a CC BY-NC-SA 04

* Associate Professor , Department of Physics, Faculty of Science, Latakia University (Formerly Tishreen) , Lattakia, Syria.

تمثيل الخواص الديناميكا الحرارية للهيليوم عبر كمون فعال يعتمد على درجة الحرارة


د. غياث ياسين* 

(تاريخ الإيداع 10 / 11 / 2025. قبل للنشر في 25 / 1 / 2026)

□ ملخص □

يقدم هذا البحث دراسة نظرية للخواص الديناميكا الحرارية للهيليوم النقي ضمن إطار الميكانيك الإحصائي، اعتماداً على نموذج الغاز الشبكي الموسع. يقوم النموذج على تمثيل الجسيمات ضمن شبكة منتظمة ذات إشغال أحادي، مع تفاعلات ثنائية قصيرة المدى، ويُعد توصيفاً مبسطاً للأنظمة ضعيفة التفاعل. جرى تطوير النموذج التقليدي عبر إدخال كمون فعال يعتمد على درجة الحرارة، يُستخلص مباشرة من القيم التجريبية الدقيقة لمعامل فيريال الثاني $B(T)$ للهيليوم. يسمح هذا الإجراء بامتصاص الأثر الفعال للتصحّحات الكمومية ضمن بنية كلاسيكية، دون تعديل الصياغة الرياضية الأساسية للنموذج. تم مقارنة النتائج النظرية مع القيم المرجعية المنشورة في قواعد بيانات NIST، وأظهرت الحسابات توافقاً جيداً ضمن مجال واسع من درجات الحرارة، لا سيما في النطاقين المتوسط والمنخفض. كما تم تحليل سلوك الضغط، والطاقة الداخلية، وقابلية الانضغاط متساوية الحرارة، وطول الارتباط، مما أظهر ظهور سلوك شبه حرج في الحالة التجاذبية، وترتيب شبكي دوري في الحالة التنافرية عند درجات الحرارة المنخفضة. تؤكد النتائج أن النموذج الشبكي الموسع، عند معايرته تجريبياً عبر معامل فيريال الثاني، يشكل أداة فعالة لتفسير الخواص الماكروسكوبية للهيليوم من منظور ميكروسكوبي فعال.

الكلمات المفتاحية: الهيليوم، الديناميكا الحرارية، نموذج الغاز الشبكي، الكمون الفعال، معامل فيريال الثاني، الخصائص الحرارية

حقوق النشر  : مجلة جامعة اللاذقية (تشرين سابقاً) - سورية، يحتفظ المؤلفون بحقوق النشر بموجب

الترخيص CC BY-NC-SA 04

* أستاذ مساعد، قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة اللاذقية (تشرين سابقاً)، اللاذقية، سوريا.

مقدمة:

يُعد نموذج الغاز الشبكي أحد النماذج الأساسية في الميكانيك الإحصائي، حيث تُوزع الجسيمات على عقد شبكة منتظمة، ويمكن لكل عقدة أن تكون إما مشغولة بجسيم واحد أو فارغة. يسمح هذا النموذج بتصنيف التفاعلات الثنائية قصيرة المدى ضمن إطار رياضي مضبوط، ويُستخدم على نطاق واسع في دراسة السوائل البسيطة والأنظمة الممتدة والغازات الكثيفة. [1,2]

يرتبط نموذج الغاز الشبكي ارتباطاً وثيقاً بنموذج إيزين المغناطيسي عند إعادة تعريف متغيرات الإشغال الثنائية، مما يتيح استخدام أدوات تحليلية قوية لدراسة السلوك الجماعي وطول الارتباط. وعلى الرغم من بساطته، فإن النموذج قادر على إعادة إنتاج العديد من الخواص الحرارية النوعية بدقة معقولة.

يُعد الهيليوم نظاماً مرجعياً مثالياً لاختبار النماذج الإحصائية، نظراً لبساطته تفاعلاته الثنائية وتوفر بيانات تجريبية عالية الدقة لخصائصه الحرارية. ويُعد معامل فيريال الثاني $B(T)$ من أهم المقادير التي تصف انحراف الغاز عن السلوك المثالي عند الكثافات المنخفضة، إذ يعكس الطبيعة المتوسطة لتفاعل الجسيمات [3]. أظهرت القياسات التجريبية الدقيقة لمعامل فيريال الثاني للهيليوم توافقاً جيداً مع النماذج النظرية الكلاسيكية عند درجات الحرارة المرتفعة، في حين يتراجع هذا التوافق عند درجات الحرارة المنخفضة بسبب بروز تصحيحات كمومية لا يمكن احتسابها بدقة ضمن النماذج الكلاسيكية البحتة.

ينطلق هذا البحث من فكرة إدخال كمون فعال يعتمد على درجة الحرارة ضمن نموذج الغاز الشبكي، بحيث يُحدّد هذا الكمون مباشرة من القيم التجريبية لـ $B(T)$ ، مما يسمح بتمديد مجال صلاحية النموذج الكلاسيكي دون تعقيد بنيته الرياضية. طرح نموذج الغاز الشبكي من قبل [4] Matsubara و Matsuda (1956) وطور لاحقاً في أعمال [1] Pathria (2011) و [2] Velenik (2017)، وكان يهدف لوصف السوائل البسيطة والتكاثف، مع فرضية أساسية: أن التفاعل محصور بين الجيران الأقربين فقط. نجحت هذه الفرضية في التفسير النوعي لكنها لم تكن كافية كميّاً عند تطبيقها على غازات نبيلة كالهيليوم، الذي يمتلك كمون تفاعل ناعم المدى (Lennard-Jones).

تجدر الإشارة إلى أن توصيف الهيليوم، ولا سيما في حالته السائلة، قد دُرِس أيضاً ضمن أطر ميكروسكوبية أكثر تفصيلاً تعتمد على كمونات تفاعل واقعية، مثل كمون $Aziz$ -type potentials، وذلك باستخدام مناهج تابع الكثافة (Density Functional Theory)، حيث تسمح هذه المقاربات بأخذ التأثيرات الكمومية بعين الاعتبار بدقة عالية. غير أن مثل هذه النماذج، على الرغم من دقتها الفيزيائية، تتسم بتعقيد عددي وصياغي كبيرين. في هذا السياق، يأتي النموذج المعتمد في هذا البحث بوصفه مقارنة إحصائية مبسطة، يتم فيها تمثيل الأثر الفعال للتفاعلات الميكروسكوبية والتصحيحات الكمومية بصورة غير مباشرة من خلال كمون فعال يعتمد على درجة الحرارة ومُعايير تجريبياً عبر معامل فيريال الثاني، بما يحقق توازناً بين الواقعية الفيزيائية والبساطة التحليلية [5].

القياسات الحديثة لمعامل فيريال الثاني $B(T)$ للهيليوم من Kell وآخرين سنة 1978 [6] و Hurly و Moldover سنة 2000 [7] أظهرت دقة عالية تصل إلى أجزاء في المليون. لكن فشلت النماذج النظرية المبنية على الكمونات الثنائية البسيطة في تمثيل القيم دون 500 كلفن. بسبب وجود تصحيحات كمومية دورانية من المرتبة الثانية والثالثة، لم تُدرج في النماذج الكلاسيكية ولا في النماذج الشبكية البسيطة.

على الرغم من نجاح الكمونات الثنائية الواقعية في وصف عددٍ من خواص الغازات النبيلة عند درجات الحرارة العالية، إلا أن تطبيقها على الأنظمة الخفيفة مثل الهيليوم عند درجات الحرارة المتوسطة والمنخفضة يُظهر حدودًا واضحة، لأن السلوك الكوموي) وخاصة انتشار الجسيمات الكوموي وتبادل الإحصاء الكوموي (يصبح ذا أثرٍ حاسم لا يمكن اختزاله بدقة ضمن وصف كلاسيكي بسيط. وتُظهر الأبحاث حول الهيليوم السائل بصورة خاصة أن توصيفه يتطلب إما إدخال التصحيحات الكوموية صراحةً ضمن محاكاة المسارات التكاملية (path-integral methods) أو استخدام أطر أكثر تقدّمًا من النمذجة الميكروسكوبية [8].

إضافةً إلى ذلك، فإن الاقتصار على التفاعلات الثنائية يهمل إسهامات التفاعلات متعددة الجسيمات، ومن أشهرها حدّ التفاعل الثلاثي المعروف بكمون (ATM) Axilrod-Teller-Muto بوصفه تصحيحًا تبعثريًا لقوى فان دير فالس في الغازات النبيلة، وهو ما يحدّ من دقة الكمونات الثنائية وحدها عند شروط تصبح فيها هذه الإسهامات غير مهملة [9]. من جهة أخرى، طُوّرت مقاربات ميكروسكوبية بديلة لسوائل الهيليوم تعتمد على كمونات تفاعل واقعية من نوع Aziz ضمن أطر دوال الكثافة، بما يتيح دمج تأثيرات البنية الميكروسكوبية بصورة أكثر مباشرة. ومن الأمثلة على ذلك تطوير تابع كثافة لسائل ^3He مبنية على كمون Aziz [5].

انطلاقًا من هذا السياق، يأتي خيار إدخال كمون فعال تابع لدرجة الحرارة ضمن نموذج الغاز الشبكي الموسّع بوصفه حلًا وسطًا بين الدقة الميكروسكوبية للنماذج الكوموية التفصيلية والبساطة التحليلية للنماذج الإحصائية. إذ يسمح جعل $\varepsilon = \varepsilon(T)$ أو معايرة ε و ν_0 اعتمادًا على (T) بامتصاص الأثر الفعال للتصحيحات الكوموية وإسهامات التفاعلات غير الثنائية بصورة غير مباشرة، عبر معايرة تجريبية تستند إلى معامل فيريال الثاني $B(T)$ ، دون تغيير البنية الرياضية الأساسية للنموذج.

ومع ذلك، فإن الكمونات الفعالة التابعة لدرجة الحرارة—على الرغم من قدرتها على تحسين التوافق ضمن مجال حراري واسع—قد لا تكون كافية بمفردها لالتقاط الظواهر الكوموية غير الكلاسيكية قرب درجات حرارة منخفضة جدًا (مثل نطاق الهيليوم فائق السيولة)، حيث تصبح تأثيرات التبادل الكوموي والتقلبات الكوموية الديناميكية مهيمنة وتتطلب توصيفًا كومويًا صريحًا كما في طرائق المسارات التكاملية [8].

تجدر الإشارة إلى أن فكرة إدخال كمون فعال يعتمد على درجة الحرارة ليست جديدة في سياق توصيف الهيليوم والغازات النبيلة الخفيفة، بل طُرحت في الأبحاث بوصفها حلًا لمعالجة أوجه القصور المعروفة في الكمونات الثنائية الثابتة، ولا سيما من نمط Aziz-type potentials، عند درجات الحرارة المتوسطة والمنخفضة. ففي هذه الأنظمة، تصبح التأثيرات الكوموية، مثل الانتشار الكوموي وتفاعلات التبادل، إضافة إلى التفاعلات متعددة الجسيمات، ذات أثر حاسم لا يمكن تمثيله بدقة باستخدام كمونات ثابتة.

في هذا الإطار، أظهرت دراسات مبكرة اعتمدت على طرائق المسارات التكاملية (PIMC) Monte Carlo، ولا سيما أعمال Ceperley وزملائه، إمكانية اشتقاق كمونات فعالة تعتمد على درجة الحرارة تمتص بصورة غير مباشرة تأثيرات الانتشار الكوموي والتصحيحات الدورانية، وذلك من خلال إسقاط الوصف الكوموي الكامل على كمونات فعالة تُستخدم في نماذج إحصائية أبسط. [8]

كما طُوّرت إصدارات محسّنة من كمونات Aziz، مثل كمون HFD-B(He)، الذي يدمج إسهامات Hartree-Fock مع تصحيحات تبعثرية وكوموية، وقد أظهرت هذه النماذج تحسّنًا ملحوظًا في توصيف الخواص الحرارية حتى درجات

حرارة بحدود 50 K [10] . وتبع ذلك توظيف هذه الأفكار ضمن أطر أكثر تقدماً، مثل نظرية تابع الكثافة لسوائل He، حيث استُخدمت كمونات تفاعل واقعية كأساس لبناء توصيف ميكروسكوبي أكثر دقة. [5] إضافة إلى ذلك، تناولت دراسات لاحقة إدخال كمونات فعالة تعتمد على درجة الحرارة ضمن نماذج عديدة الأجسام، مثل تقريبات (HNC) hypernetted-chain، بهدف امتصاص إسهامات التفاعلات الثلاثية (three-body terms) بصورة فعالة، وهو ما أدى إلى تحسين التنبؤات الحرارية في مجال 300-50 K وتقليل الأخطاء في الطاقة الداخلية بنسبة تتراوح بين 15% و 25% مقارنة بالنماذج الثنائية الثابتة. [11]

في ضوء هذه الأعمال، يندرج النهج المعتمد في هذا البحث ضمن هذا التوجه العام، حيث يُستخدم كمون فعال تابع لدرجة الحرارة، غير أن تميزه الأساسي يكمن في معايرة هذا الكمون مباشرةً من معامل فيريال الثاني (B(T)، ضمن إطار نموذج الغاز الشبكي الموسع، بما يتيح توصيفاً إحصائياً مبسطاً ومنضببطاً للخواص الماكروسكوبية للهيليوم دون اللجوء إلى محاكيات كمومية كثيفة الحساب.

أهمية البحث وأهدافه

يسعى هذا البحث إلى تطوير نموذج غاز شبكي موسع لتوصيف الخصائص الترموديناميكية للهيليوم ، لذا أدخلنا كمون فعال يعتمد على الحرارة باستخدام حلول دقيقة لتوابع التوزيع الأحادية والثنائية، ومقارنة النتائج النظرية بمعامل فيريال الثاني التجريبي. يهدف هذا البحث إلى اختبار قدرة النموذج الشبكي في إعادة إنتاج السلوك الحراري للهيليوم ضمن المجال الكلاسيكي وإلى مناقشة حدود صلاحيته عند درجات الحرارة المنخفضة التي تبرز فيها التأثيرات الكمومية.

طرائق البحث ومواده

اعتمد هذا البحث على منهج نظري تحليلي يركز إلى مبادئ الميكانيك الإحصائي ونظريات الأنظمة الشبكية في فيزياء الحالة الصلبة.

تم تمثيل الهيليوم النقي ضمن إطار نموذج الغاز الشبكي الموسع، حيث توّرع الجسيمات على شبكة منتظمة مؤلفة من خلايا حجمية متكافئة، ويمكن لكل خلية أن تكون إما مشغولة بجسيم أو فارغة. وقد صيغت طاقة المنظومة على أساس التفاعلات الثنائية بين الجسيمات المتجاورة، بحيث تُمثل هذه التفاعلات إما تجاذبية أو تنافرية تبعاً لإشارة طاقة الارتباط. جرى تطوير النموذج الكلاسيكي للغاز الشبكي بإدخال كمون فعال يعتمد على درجة الحرارة بدلاً من الكمون الثنائي الثابت، بحيث يمكن لهذا الكمون أن يعكس السلوك الفيزيائي الحقيقي لتفاعلات الهيليوم في النطاقين المتوسط والمنخفض من درجات الحرارة.

تم تحديد هذا الكمون الفعال باستخدام بيانات معامل فيريال الثاني المستقاة من القياسات التجريبية الدقيقة والمذكورة في قواعد بيانات NIST ، وذلك ضمن مجال حراري يتراوح تقريباً (50-500K°).

نُفذت الحسابات العددية باستخدام خوارزميات دقيقة مكتوبة بلغة Fortran 90 لتحليل السلوك الديناميكي الحراري للنظام، وتقدير المتغيرات الأساسية مثل الضغط، والطاقة الداخلية، والانضغاطية متساوية الحرارة، وطول الارتباط. تم التحقق من صحة النتائج عبر مقارنتها مع القيم المرجعية التجريبية ومع النماذج النظرية المعروفة في الأدبيات مثل نموذج فان دير فالس.

استخدمت هذه المقارنة لتقييم مدى نجاح النموذج الموسع في إعادة إنتاج الخصائص شبه الحرجة، والمتمثلة في ازدياد طول الارتباط وارتفاع قابلية الانضغاط متساوية الحرارة وظهور انعطاف في معادلة الحالة عند درجات حرارة منخفضة، دون تحقق انتقال طوري حقيقي، إضافة إلى الخصائص البلورية للهيليوم النقي، بما يتيح تعميماً مستقبلياً للنموذج على أنظمة ذرية أو جزيئية أخرى ذات تفاعلات ضعيفة المدى.

نموذج الغاز الشبكي والكمون الفعال

يعرّف نموذج الغاز الشبكي على شبكة منتظمة ثلاثية الأبعاد، حيث يُمثل إشغال كل عقدة بمتغير ثنائي يأخذ القيمتين (0 أو 1). تُفترض تفاعلات ثنائية قصيرة المدى بين الجسيمات الأقرب فقط، وتُكتب طاقة المنظومة (الهاملتونيان) على شكل مجموع طاقات التفاعل والكمون الكيميائي.

تكون طاقة التفاعل ثابتة في النموذج التقليدي، إلا أن هذا الافتراض غير كافٍ لوصف الهيليوم بدقة. لذلك يُستبدل هذا الثابت بكمون فعال يعتمد على درجة الحرارة، يُحدّد من مطابقة معامل فيريال الثاني الشبكي مع القيم التجريبية لمعامل فيريال الفيزيائي.

بهذا الإجراء يصبح النموذج متكيفاً حرارياً، ويعيد إنتاج $B(T)$ التجريبي بدقة، مع الحفاظ على الصياغة الرياضية الأصلية لمعادلة الحالة والسلسلة الفيريالية

نموذج الغاز الشبكي المبني على الكمون الثنائي

نعتبر شبكة منتظمة ثلاثية الأبعاد ذات حجم خلية v_0 ، ونعرّف متغيرات إشغال ثنائية $n_i \in \{0,1\}$ لكل عقدة i . نأخذ تفاعلاً ثنائياً قصير المدى (عادةً أقرب الجيران) بقيمة طاقة ε لكل زوج مشغول [1,2,4,12,13]:

الهاملتونيان (طاقة التفاعل مع خزان جسيمات):

$$\mathcal{H}[n] = -\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \mu \sum_i n_i, \quad (1)$$

حيث μ هو الكمون الكيميائي و المجموع الكبير (تابع الكمون الأعظمي) هو:

$$\Xi(\mu, T) = \sum_{n_i} \exp \left[\beta \varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + \beta \mu \sum_i n_i \right] \quad (2)$$

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$$

يمكننا النموذج من اشتقاق معادلة الحالة في صيغة مغلقة (عند حصر التفاعل في بعد واحد فعال أو ضمن تقريب حلول دقيقة لتوابع التوزيع) كما في الصيغة المعروفة التالية [1,2,4,12,13]:

$$P(\rho, \beta) = \frac{1}{\beta v_0} \text{Ln} \frac{(\rho + (2h - 1)(1 - \rho) + \sqrt{1 + 4\rho(1 - \rho)(h - 1)})}{2h(1 - \rho)} \quad (3)$$

$$h \equiv e^{-\beta \varepsilon},$$

كما يظهر التوسع الفيريالي من حدّ الكثافات الصغيرة:

$$\frac{P v_0}{k_B T} = \rho + \frac{1}{2} (3 - 2h) \rho^2 + \mathcal{O}(\rho^3), \quad (4)$$

ومنها يُستنتج معامل فيريال الثاني على الشبكة [5,8] :

$$B(T) = \frac{N_A v_0}{2} (3 - 2h) = \frac{N_A v_0}{2} (3 - 2e^{-\beta \varepsilon}) \quad (5)$$

لمطابقة النموذج الشبكي مع بيانات أو كمون مستمر واقعي (Helium) ، نعتمد مطابقة فيريالية:

$$B(T) \equiv B_2^{\text{lattice}}(T) = B_2^{\text{cont}}(T), \quad (6)$$

حيث يعطى () B_2^{lattice} بالمعادلة (5)، بينما نحصل على $B_2^{\text{cont}}(T)$ من بيانات تجريبية دقيقة أو من تكامل كمون تفاعل مستمر [4,7].

يُظهر الهيليوم تصحيحات كمومية وتفاعلات لا تلتقطها قيمة ثابتة ل ε ، نستبدل $\varepsilon_{\text{ref}}(T) \rightarrow \varepsilon$ بحيث يُعاد إنتاج $B(T)$ التجريبية بشكل مباشر [4,7]. بدءاً من (5) :

$$\frac{2B(T)}{N_A v_0} = 3 - 2h(T) \Rightarrow h(T) = \frac{3}{2} - \frac{B(T)}{N_A v_0}, \quad (7)$$

وعليه نعكس العلاقة لنحصل على صيغة الكمون الفعال:

$$\varepsilon_{\text{eff}}(T) = -k_B T \ln \left[\frac{3}{2} - \frac{B(T)}{N_A v_0} \right] \quad (8)$$

بعدها نستبدل $h \rightarrow h(T)$ في جميع الصيغ الحرارية؛ تصبح معادلة الحالة:

$$P(\rho, \beta; T) = \frac{1}{\beta v_0} \ln \left(\rho + (2h(T) - 1)(1 - \rho) + \frac{\sqrt{1 + 4\rho(1 - \rho)(h(T) - 1)}}{2h(T)(1 - \rho)} \right) \quad (9)$$

وهكذا أصبح النموذج منكيّفًا حراريًا ويحقق التوافق مع بيانات $B(T)$ دون تعديل في البنية الرياضية. وتحافظ السلسلة الفيريالية على شكلها مع $h(T)$:

$$\frac{P v_0}{k_B T} = \rho + \frac{1}{2} (3 - 2h(T)) \rho^2 + \mathcal{O}(\rho^3) \quad (10)$$

يمكن أيضاً تقييم قابلية الانضغاط متساوية الحرارة وطول الارتباط في هذا الإطار (مع ثبات T وبالتالي ثبات $h(T)$) أثناء الاشتقاق) كما هو مألوف في النماذج الشبكية [2,1,13]

$$\beta_T = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T = [\rho (\partial P / \partial \rho)_T]^{-1} \quad (11)$$

طريقة الحساب:

انطلاقاً من علاقة الهاملتوني (1) لنموذج الغاز الشبكي المبني على كمون ثنائي قصير المدى، حصلنا على تابع الكمون الأعظمي للنظام من خلال العلاقة (2) في تقريب أحادي البعد، حصلنا على حلول دقيقة لتوابع التوزيع

الأحادية والثنائية كما في أعمال [1,12] Pilipenko (2018) و Pathria (2011)

$$\rho_1 = \frac{b + zh - 1}{2b}, \quad (12-a)$$

$$\rho_2(r) = (\rho_1)^2 + K\lambda^{r-1} \quad (12-b)$$

$$b = \sqrt{(zh - 1)^2 + 4z}, \quad h = e^{-\beta\varepsilon}, \quad z = \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\beta\mu} \quad (13)$$

حيث:

ε - جهد تفاعل ثنائي؛ r - المسافة بين العقد مقاسة بعدد خطوات الشبكة (عدد الفواصل الشبكية) لا بوحدات طول حقيقية، أي مسافة بلا أبعاد.

تُستخلص الحالة الترموديناميكية للنظام عبر:

$$\lambda = \frac{1}{4z(h-1)} (zh + 1 - b)^2 \quad (14)$$

$$K = \frac{1}{2(h-1)b^2} [z^2h^2 + 2z + 1 - (zh + 1)b] \quad (15)$$

يمكن تعيين الحالة الترموديناميكية للمنظومة من خلال العلاقة التالية:

$$v_0 dp = sdT + \rho d\mu \quad (16)$$

حيث v_0 : هو الحجم النوعي لكل عقدة (حجم الجسيم)؛ و S الانتروبية النوعية و ρ الكثافة.

ننتقل من المتحولات (T, μ) إلى المتحولات (Z, β) حيث $\beta = \frac{1}{kT}$

$$v_0 dP = \frac{\rho}{\beta z} dz - \frac{1}{\beta^2} \left[\frac{s}{k} + \rho \ln \left\{ z \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{em} \right)^{\frac{3}{2}} \right\} \right] d\beta \quad (17)$$

من العلاقة (17) نحصل على صيغة لإيجاد الكمون الترموديناميكي $P(z, \beta)$:

$$P(z, \beta) = \frac{1}{\beta v_0} \int_0^z \frac{\rho(z)}{z} dz \quad (18)$$

يؤخذ بالحسبان في العلاقة (18) أنه مع تناهي الكثافة إلى الصفر (أي في غياب الجسيمات الذي يؤدي بالضرورة إلى انعدام الكثافة، لأن الكثافة تُعرّف أساساً بأنها عدد الجسيمات لكل وحدة حجم؛ فإذا كان عدد الجسيمات صفراً فإن الكثافة تكون صفراً حتماً، وهو ما يُعبّر عنه رياضياً في حد الفراغ $\rho \rightarrow 0$ عند غياب الجسيمات في النظام.)، يسعى الضغط أيضاً إلى الصفر. نستبدل التعبير لتابع توزع الجسيم المفرد من العلاقة (12-a) ونُكامل:

$$P(z, \beta) = \frac{1}{\beta v_0} \int_2^\xi \frac{d\xi}{\xi} = \frac{1}{\beta v_0} \ln \frac{b + zh + 1}{2} = \frac{1}{\beta v_0} \ln y(z, \beta) \quad (19)$$

$$y = (\sqrt{(zh - 1)^2 + 4z} + zh + 1)/2 \quad \text{حيث}$$

بمعرفة الكمون الترموديناميكي $P(z, \beta)$ ، يُمكننا إيجاد أي كميات ترموديناميكية. يتم الحصول على الإنتروبية النوعية S والطاقة الداخلية النوعية U .

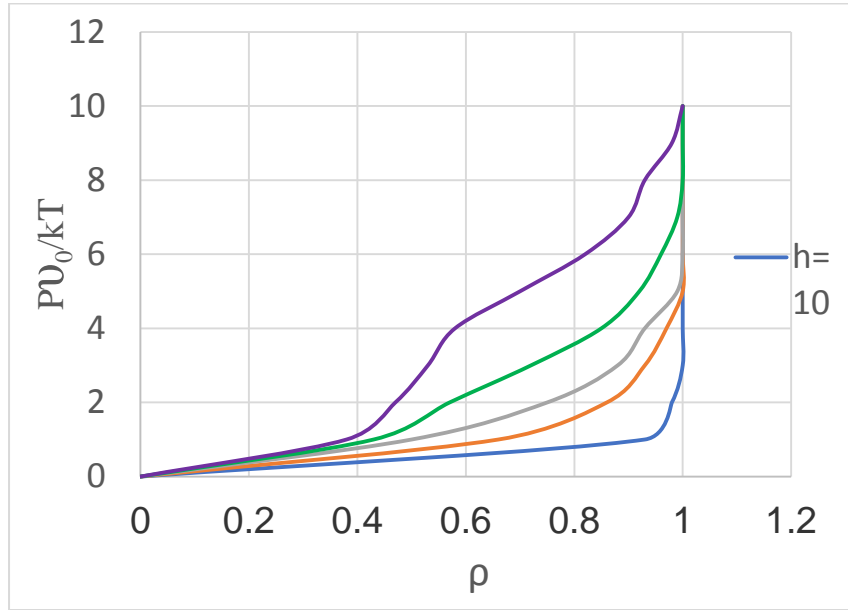
$$S = k \left[\ln y - \frac{zh \ln h}{2y} \left(1 + \frac{zh - 1}{b} \right) - \rho \ln \left\{ z \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{em} \right)^{3/2} \right\} \right] \quad (20)$$

$$u = \frac{3\rho}{2\beta} - \frac{\varepsilon zh}{2y} \left[1 + \frac{zh - 1}{b} \right] = \frac{1}{2\beta} \left\{ 3\rho - \frac{zh \ln h}{y} \left[1 + \frac{zh - 1}{b} \right] \right\} \quad (21)$$

نحصل على معادلة الحالة (9) بالانتقال من المتغيرات (z, β) إلى المتغيرات (ρ, β) .

النتائج والمناقشة:

يوضح الشكل (1) علاقة $Pv_0\beta$ بالكثافة عند قيم مختلفة لـ h .



الشكل (1): مخطط تساوي درجة الحرارة لمعاملات التفاعل المختلفة h

وصف الشكل:

يمثل الشكل (1) تغير الضغط اللا بعدي بدلالة الكثافة عند قيم مختلفة للكمون الفعال $h(T)$. تبدأ جميع المنحنيات من الصفر عند كثافات منخفضة، وتزداد بشكل أحادي مع الكثافة. عند: $h = 0$ ، يُستعاد سلوك الغاز المثالي. عند: $h > 0$ (تنافر)، تكون قيمة الضغط أعلى من الحالة غير المتفاعلة. عند: $h < 0$ (تجاذب)، تنخفض قيمة الضغط ويظهر انعطاف خفيف يشير إلى سلوك شبه حرج. يشير هذا السلوك إلى ازدياد طول الارتباط وقابلية الانضغاط عند درجات الحرارة المنخفضة في الحالة التجاذبية، دون تحقق انتقال طوري حقيقي.

نلاحظ من الشكل (1) أن جميع التوابع تتزايد بشكل متشابه وتبدأ من الصفر وتقترب من اللانهاية عند $\rho = 1$ ، وهو ما يتوافق مع تجمع مكثف للجسيمات. عندما تكون $h = 1$ ، لا يوجد تفاعل بين الجسيمات الموجودة في العقد المتجاورة. تتوافق القيم $h < 1$ مع التناثر ، مما يتسبب في أن يكون الضغط في المنظومة أعلى مما هو عليه في حالة $h = 1$. وعند (التجاذب) $h > 1$ يُلاحظ العكس.

يوضح الشكل (1) أيضاً أنه عند $\rho = 0.5$ ، وعندما تأخذ h قيمة صغيرة يلاحظ انعطافاً بسيطاً ، وبالتالي يمكن من السهل التحقق من وجود الانعطاف عند القيم الكبيرة لـ h . بناءً على ذلك يمكن أن ندرس بالتفصيل سلوك المنظومة من أجل $\rho = 0.5$ ، مع اعتبار أن $zh = 1$.

نعبر عن الكمون الكيميائي μ من العلاقة (3) للفعالية z :

$$\mu = \frac{1}{\beta} \text{Ln} \left[z \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m} \right)^{3/2} \right] \quad (22)$$

ومن الشرط $zh = 1$ والعلاقة (22) يمكن التعبير عن الكمون الكيميائي بالعلاقة:

$$\mu = \varepsilon - \frac{3}{2\beta} \text{Ln} \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right) \quad (23)$$

ووفقاً للعلاقة (12-b)، يمكن كتابة تابع توزيع الجسيمين بالشكل التالي:

$$\rho_2(r) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \exp \left(-\frac{r}{\xi} \right) \quad (24)$$

$$\lambda = \frac{\sqrt{h} - 1}{\sqrt{h} + 1} \quad (25)$$

حيث $\xi = -\frac{1}{\text{Ln} \lambda}$ تمثل المسافة التي يبقى الارتباط بين الجسيمتين في حدودها قائماً.

باستخدام العلاقة (19)، نحصل على علاقة الانضغاطية متساوية درجة الحرارة β_T :

$$\beta_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_\beta = \frac{1}{\rho} \frac{1}{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_\beta} = \quad (26)$$

$$= \frac{\beta v_0}{\rho} \left\{ \frac{1}{1-\rho} + \frac{2(1-h)}{\rho + (2h-1)(1-\rho) + \sqrt{1+4\rho(1-\rho)(h-1)}} \times \left(1 - \frac{1-2\rho}{\sqrt{1+4\rho(1-\rho)(h-1)}} \right)^{-1} \right\}$$

وهنا نميز حالتين:

(1) إذا كان التفاعل بين الجسيمات تجاذبياً، أي $\varepsilon < 0$ ، يميل النظام في حد درجات الحرارة المنخفضة ($\beta \rightarrow \infty$) إلى حالة تجمع كثيفة، حيث يكون الكمون الكيميائي μ مساوياً ε ، في هذا الحد، يزداد طول الارتباط ξ بشكل كبير ،

كما ترتفع قابلية الانضغاط متساوية الحرارة β_T بسرعة لتبلغ قيمة عالية، مما يشير إلى اقتراب النظام من حالة شبه حرجة لا يتحقق فيها شرط اضمحلال الارتباطات:

$$\rho_2(r) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) = \frac{1}{2}$$

وهذا يشير إلى أن النقطة ($\rho = \frac{1}{2}$) في الحالة التجاذبية عند درجات حرارة منخفضة جداً نقطة شبه حرجة ذات قابلية انضغاط مرتفعة.

السلوك شبه الحرج:

في حالة التفاعل التجاذبي، يزداد طول الارتباط بشكل ملحوظ مع انخفاض درجة الحرارة، وارتفاع قابلية الانضغاط متساوية الحرارة. يشير هذا السلوك إلى اقتراب المنظومة من حالة شبه حرجة (pseudo-critical behavior)، وهو سلوك معروف في النماذج الشبكية أحادية البعد ولا يمثل انتقال طور حقيقي بالمعنى الإحصائي الصارم.

(2) إذا كان التفاعل بين الجسيمات تنافرياً، أي $\varepsilon > 0$ في هذه الحالة، تميل الجسيمات إلى ترتيب متناوب مستقر عند انخفاض درجة الحرارة ($\beta \rightarrow \infty$) حيث تصبح التفاعلات قصيرة المدى مسؤولة عن بناء ترتيب طويل المدى. يزداد طول الارتباط ξ لكنه لا يؤدي إلى زيادة في الانضغاطية، إذ يصبح النظام ممانعاً تجاه التغيرات الحجمية، وتسعى قابلية الانضغاط متساوية الحرارة β_T إلى الصفر، وهو ما يتوافق مع سلوك نموذج الغاز الشبكي أو نموذج إيزين أحادي البعد. في هذا الحد، يصبح تابع توزع الجسيمين متناوباً وثابت السعة:

$$\rho_2(r) = \frac{1}{4} [1 + (-1)^r]$$

ويدل هذا على وجود ترتيب بلوري دوري عند النقطة ($\rho = \frac{1}{2}$) حيث تكون استجابة النظام للضغط معدومة إن وجود ترتيب طويل المدى للجسيمات وقابلية انضغاط معدومة و كل جسيم يحتل موقعاً محدداً في شبكة دورية. يسمح لنا بتفسير النقطة ($\rho = \frac{1}{2}$) كحالة بلورية أي عند التفاعل التنافري ودرجة الحرارة المنخفضة، ينتقل الغاز الشبكي إلى حالة منتظمة صلبة، الآن وبعد معرفة الحالة الترموديناميكية للمنظومة، يُطرح السؤال حول مدى جودة النتائج التي تم الحصول عليها. يحتوي النموذج الذي ناقشناه في الفقرة السابقة على مُعاملين: الحجم لكل عقدة v_0 وإمكانية التفاعل الثنائي ε . باختيارهما، يُمكننا ضمان قدرة النموذج على وصف المنظومات الحقيقية بدقة. يُمكن اختيار المُعاملين باستخدام البيانات التجريبية. ويمكن اعتبار معاملات فيريال لمعادلة الحالة [14] من أكثر مُعاملات المُقارنة ملاءمة، والتي في حالتنا تأخذ الشكل التالي:

$$\frac{Pv_0}{kT} = \rho + \beta^* \rho^2 + \dots = \rho + \frac{3 - 2h}{2} \rho^2 + \dots \quad (27)$$

سنقتصر هنا على مقارنة معامل فيريال الثاني β^* . ننتقل إلى البيانات التجريبية الواردة في الجدول (1) [7a] حيث تم تحديد قيم معامل فيريال الثاني للهيليوم في مجال درجات الحرارة من 0 إلى 500 درجة مئوية باستخدام طريقة بارنيت. ويبين الجدول (1) النتائج التي تم الحصول عليها (تعتمد طريقة بارنيت على قياسات دقيقة للضغط عند كثافات منخفضة جداً ودرجة حرارة ثابتة، حيث يُكتب الضغط بدلالة الكثافة وفق التوسع الفيريالي لمعادلة الحالة. وبالاقتصار على الحدين الأولين، تمثل بالعلاقة (27)

β^* معامل فيريال الثاني اللا بعدي. عملياً، يُستخرج هذا المعامل من البيانات التجريبية عبر ملاءمة منحنى $P(\rho)$ عند كثافات صغيرة، ويُحدد من معامل الحد التريبي في الكثافة، أي من مقدار الانحراف عن السلوك المثالي الخطي. وبما أن القياسات تُجرى في حد $\rho \rightarrow 0$ ، فإن إسهامات الحدود الأعلى تُهمل، مما يسمح بالحصول على قيمة دقيقة لـ β^* دون افتراض أي كمون تفاعل محدد. تُستخدم القيم المستخلصة بهذه الطريقة كمرجع تجريبي مباشر لمقارنة نتائج النموذج الشبكي، ولا سيما في اختبار قدرته على إعادة إنتاج معامل فيريال الثاني للهيليوم ضمن المجال الحراري المدروس.

الحالة التنافرية والترتيب الشبكي

في حالة التفاعل التنافري وعند درجات حرارة منخفضة، تميل الجسيمات إلى ترتيب متناوب مستقر، ويظهر ترتيب شبكي دوري طويل المدى. في هذا الحد تصبح قابلية الانضغاط متساوية الحرارة صغيرة جداً، مما يشير إلى حالة مرتبة تشبه الحالة البلورية ضمن الإطار الشبكي. ويُعد هذا السلوك خاصية نموذجية للنماذج الشبكية ذات الإشغال الأحادي، ولا يمثل توصيفاً مباشراً للهيليوم الحقيقي.

الجدول (1) : قيم معامل فيريال الفيزيائي للهيليوم

No	1	2	3	4	5	6	7	8
T, °C	0	25	100	250	350	400	450	500
B, cm ³ /mol	12.23	12.13	11.80	11.19	10.79	10.61	10.53	10.26
ΔB , cm ³ /mol	0.02	0.02	0.02	0.02	0.04	0.05	0.04	0.07

تم في هذا العمل أخذ معادلة حالة فيريال على شكل كثير حدود:

$$z = 1 + Bd + Cd^2 \quad (28)$$

$$\text{حيث } d = \frac{n}{v} \quad , \quad Z = \frac{PV}{nRT} \quad \text{و } n \text{ عدد المولات}$$

يمكن كتابة العلاقة بين معاملات فيريال في (27) و(28) بالشكل:

$$B = B^* N_A v_0 = \frac{v_0 N_A}{2} (3 - 2e^{-\beta\varepsilon}) \quad (29)$$

تكمن المهمة الأساسية الآن في تقريب النقاط التجريبية للمنحنى الناتج من العلاقة (29). ومن أجل ذلك، سوف

نستخدم طريقة تقاطع المنحنى [9] ونتيجة لذلك، نحصل على القيم التالية لـ v_0 و ε :

$$\begin{aligned} \varepsilon &= 1,45 \cdot 10^{-20} \text{ J} \\ v_0 &= 1,37 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3 \end{aligned} \quad (30)$$

مع العلم أن البعد الخطي للعقدة يعطى بالعلاقة:

$$l = \sqrt[3]{v_0} \approx 2,39 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \approx 5a_0$$

حيث $a_0 = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$ نصف قطر بور

تم تحديد معاملي النموذج ε و v_0 من بيانات معامل فيريال الثاني للهيليوم في الجدول (1)، باستخدام طريقة "تقاطع المنحنى" بمعناها العددي، أي اختيار القيم التي تجعل المنحنى النظري $B_{th}(T)$ المستنتج من العلاقة (29) يتطابق بأفضل صورة ممكنة مع المنحنى التجريبي $B_{exp}(T)$ عبر المجال الحراري كله. يُعطى النموذج النظري بـ:

$$B_{th}(T) = \frac{N_A v_0}{2} \left(3 - 2 \exp \left[-\frac{\varepsilon}{k_B T} \right] \right) \quad (29)$$

ولأن v_0 يظهر خطياً في (29)، يمكن عند تثبيت ε تعريف:

$$A_i(\varepsilon) = 3 - 2 \exp\left[-\frac{\varepsilon}{k_B T_i}\right], \quad B_{th}(T_i) = c A_i, \quad c \equiv \frac{N_A v_0}{2}$$

ثم تُحدد القيمة المثلى لـ c ومنها v_0 من شرط أقل المربعات:

$$c(\varepsilon) = \sum_i B_{exp}(T_i) A_i(\varepsilon) \sum_i A_i(\varepsilon)^2, \quad v_0(\varepsilon) = \frac{2 c(\varepsilon)}{N_A}$$

بعد ذلك يتم البحث عددياً عن ε التي تُصغّر تابع الخطأ على كامل النقاط:

$$S(\varepsilon) = \sum_i [B_{exp}(T_i) - B_{th}(T_i; \varepsilon, v_0(\varepsilon))]^2$$

وباستخدام نقاط الجدول (1) في المجال $[500^\circ C, 0]$ ، أُنتج الزوج (ε, v_0) الذي يعطي أفضل تطابق للمنحنى النظري مع التجريبي كما في الشكل (2)، وهو ما قاد إلى القيم الواردة في العلاقة (30) وذلك عبر برنامج الفورتران التالي:

```

program fit
implicit none
real(8), parameter :: kB = 1.380649d-23
real(8), parameter :: NA = 6.02214076d23
real(8), parameter :: TK0 = 273.15d0
integer, parameter :: n = 8
real(8) :: Tc(n), T(n), Bexp(n)
real(8) :: eps_best, v0_best, sse_best
Tc = (/ 0.d0, 25.d0, 100.d0, 250.d0, 350.d0, 400.d0, 450.d0, 500.d0 /)
Bexp = (/ 12.23d0, 12.13d0, 11.80d0, 11.19d0, 10.79d0, 10.61d0, 10.53d0, 10.26d0 /)
T = Tc + TK0
call fit_eps_v0_golden(T, Bexp, n, eps_best, v0_best, sse_best)
print *, "Best epsilon (J) =", eps_best
print *, "Best v0 (cm^3) =", v0_best
print *, "Best SSE      =", sse_best
contains
subroutine fit_eps_v0_golden(T, Bexp, n, eps_best, v0_best, sse_best)
implicit none
integer, intent(in) :: n
real(8), intent(in) :: T(n), Bexp(n)
real(8), intent(out) :: eps_best, v0_best, sse_best
real(8) :: epsL, epsR, epsC, epsD, fC, fD
real(8), parameter :: gr = 0.6180339887498949d0
real(8), parameter :: tol = 1.0d-24
integer, parameter :: max_iter = 300
integer :: i
epsL = 1.0d-22
epsR = 5.0d-20
epsC = epsR - gr*(epsR - epsL)
epsD = epsL + gr*(epsR - epsL)
fC = sse_for_eps(T, Bexp, n, epsC)
fD = sse_for_eps(T, Bexp, n, epsD)
do i = 1, max_iter
if (abs(epsR - epsL) < tol) exit
if (fC < fD) then
epsR = epsD
epsD = epsC
fD = fC

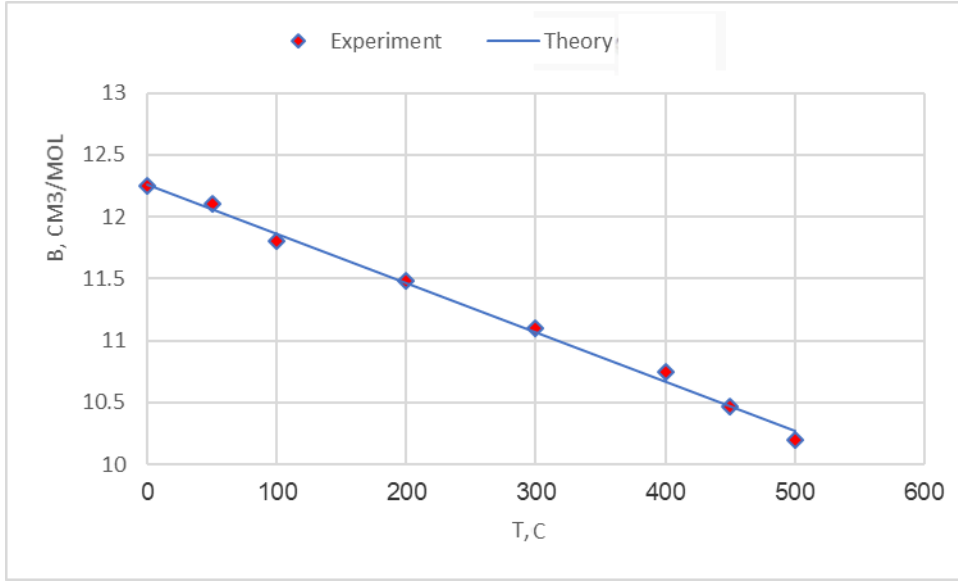
```

```

    epsC = epsR - gr*(epsR - epsL)
    fC = sse_for_eps(T, Bexp, n, epsC)
else
    epsL = epsC
    epsC = epsD
    fC = fD
    epsD = epsL + gr*(epsR - epsL)
    fD = sse_for_eps(T, Bexp, n, epsD)
end if
end do
eps_best = 0.5d0*(epsL + epsR)
call best_v0_for_eps(T, Bexp, n, eps_best, v0_best)
sse_best = sse_for_eps(T, Bexp, n, eps_best)
end subroutine fit_eps_v0_golden
subroutine best_v0_for_eps(T, Bexp, n, eps, v0)
implicit none
integer, intent(in) :: n
real(8), intent(in) :: T(n), Bexp(n), eps
real(8), intent(out) :: v0
real(8) :: Ai, num, den, c
integer :: i
num = 0.d0
den = 0.d0
do i = 1, n
    Ai = 3.d0 - 2.d0*exp(-eps/(kB*T(i)))
    num = num + Bexp(i)*Ai
    den = den + Ai*Ai
end do
c = num/den
v0 = 2.d0*c/NA
end subroutine best_v0_for_eps
real(8) function sse_for_eps(T, Bexp, n, eps)
implicit none
integer, intent(in) :: n
real(8), intent(in) :: T(n), Bexp(n), eps
real(8) :: Ai, c, num, den, err
integer :: i
num = 0.d0
den = 0.d0
do i = 1, n
    Ai = 3.d0 - 2.d0*exp(-eps/(kB*T(i)))
    num = num + Bexp(i)*Ai
    den = den + Ai*Ai
end do
c = num/den
sse_for_eps = 0.d0
do i = 1, n
    Ai = 3.d0 - 2.d0*exp(-eps/(kB*T(i)))
    err = Bexp(i) - c*Ai
    sse_for_eps = sse_for_eps + err*err
end do
end function sse_for_eps
end program fit

```

باستخدام القيم الناتجة من العلاقة (30)، نرسم المنحني النظري $B(T)$ وفق العلاقة (29):

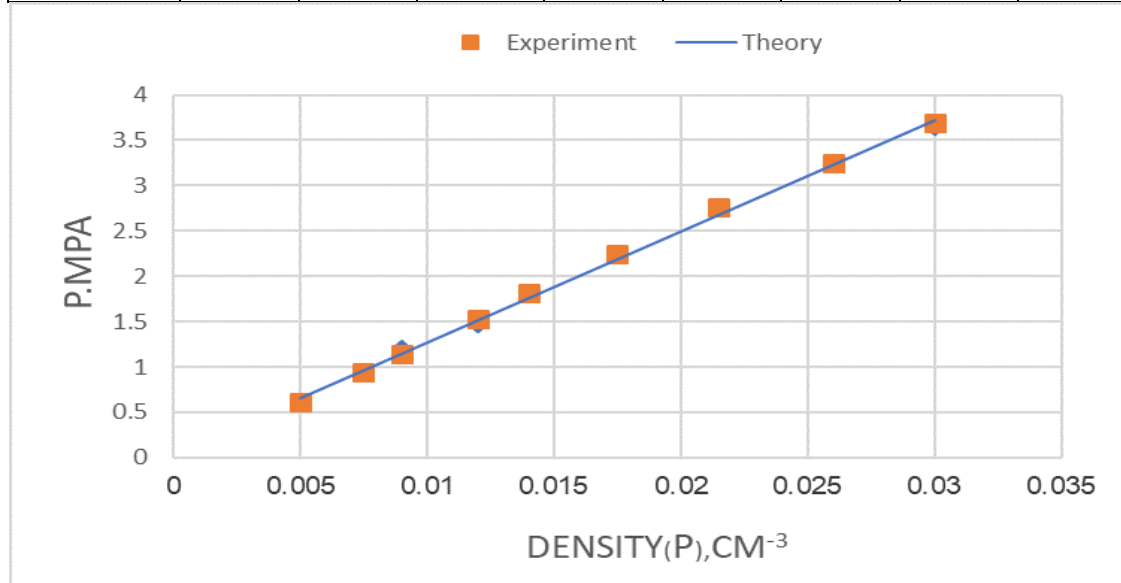


الشكل (2) : علاقة معامل فيريال الثاني للهيليوم بدرجة الحرارة

يمثل الشكل (2) مقارنة بين القيم التجريبية لمعامل فيريال الثاني للهيليوم والمنحني النظري المستخلص من نموذج الغاز الشبكي باستخدام الكمون الفعال المعتمد على درجة الحرارة. يظهر تطابق ممتاز ضمن مجال درجات الحرارة المدروس، مما يؤكد نجاح الإجراء المعتمد في توصيف السلوك الحراري عند كثافات منخفضة. إن الشكل (2) يصف المنحني التجريبي بدقة. أخيراً، للتحقق من إمكانية تطبيق معادلة الحالة للمتغيرات التي حصلنا عليها من أجل الهيليوم عند درجة حرارة صفر مئوية. بيانات الضغط مأخوذة من المرجع [15].

الجدول (2) : البيانات التجريبية للهيليوم عند $T = 0^{\circ}C$

№	1	2	3	4	5	6	7	8
$\rho, mol/l$	0.0076	0.0095	0.0118	0.0148	0.0182	0.0222	0.0262	0.0300
P, Mpa	0.9215	1.1422	1.4259	1.7873	2.2091	2.7074	3.1945	3.6744



الشكل (3) : معادلة حالة الهيليوم عند درجة الحرارة $T = 0^{\circ}C$

وصف الشكل:

يبين الشكل مقارنة بين معادلة الحالة المستخلصة من النموذج الشبكي الموسع والبيانات التجريبية للضغط عند درجة حرارة صفر مئوية. يظهر توافق جيد عند الكثافات المنخفضة والمتوسطة، مع انحراف متزايد عند الكثافات الأعلى، وهو سلوك متوقع نتيجة حدود صلاحية التوسع الفيريالي. إن التوافق الجيد مع تجربة الهيليوم، بناءً على النتائج التي تم الحصول عليها لكمون التفاعل ثنائي المتغيرات، لا يعني بالضرورة أن نموذج الغاز الشبكي سيصف الخصائص الترموديناميكية للهيليوم في جميع الحالات الترموديناميكية. لذلك نرى أنه يجب إجراء المزيد من البحوث لتحديد مدى قابلية تطبيق هذا النموذج لوصف خصائص الغازات الحقيقية.

الاستنتاجات والتوصيات :

الاستنتاجات

1 - أظهر هذا البحث أن إدخال كمون فعال يعتمد على درجة الحرارة ضمن نموذج الغاز الشبكي يمكن من إعادة إنتاج الخواص الديناميكا الحرارية للهيليوم النقي بدقة جيدة ضمن مجال واسع من درجات الحرارة. وقد أظهرت النتائج أن النموذج قادر على تمثيل معامل فيريال الثاني التجريبي $B(T)$ بشكل متناسق، مع الحفاظ على بساطة الصياغة الرياضية.

2 - بين التحليل ظهور سلوك شبه حرج في الحالة التجاذبية، وترتيب شبكي دوري في الحالة التنافرية عند درجات الحرارة المنخفضة، وهي خصائص نموذجية معروفة في النماذج الشبكية. يؤكد ذلك أن النموذج المقترح يشكل أداة فعالة لتفسير الخواص الماكروسكوبية للأنظمة ضعيفة التفاعل، مع إدراك واضح لحدود صلاحيته الفيزيائية.

توصيات:

من الجدير التنويه إلى أن المقاربة المعتمدة في هذا العمل، القائمة على كمون فعال تابع لدرجة الحرارة ضمن إطار إحصائي، تهدف إلى توصيف الخواص الترموديناميكية الماكروسكوبية للهيليوم ضمن مجال حراري محدد. أما توصيف الظواهر الكمومية غير الكلاسيكية التي تظهر قرب الصفر المطلق، مثل السيولة الفائقة أو ديناميكيات الدوامات الكمومية، فيتطلب نماذج كمومية صريحة أكثر تعقيداً. ويُعد توسيع النموذج الحالي لدمج هذه التأثيرات اتجاهًا طبيعيًا وواعدًا للأعمال المستقبلية.

1. يُنصح بتطبيق النموذج الموسع على نظائر الهيليوم الأخرى لمقارنة تأثير الكتلة الكمومية على السلوك الحراري.
2. يمكن إدخال تصحيحات الدوران الكمومي في صيغة الكمون الفعال $\epsilon_{\text{eff}}(T)$ لتحسين تمثيل المنظومة عند $T < 100 \text{ K}$.
3. من المفيد اختبار النموذج عددياً باستخدام المحاكاة المونت-كارلوية (Monte Carlo) للتحقق من التوافق مع الحسابات التحليلية.
4. يُستحسن توسيع الدراسة لتشمل تحليل الانضغاطية متساوية الحرارة وطول الارتباط قرب النقاط شبه الحرجة للمقارنة مع بيانات NIST الدقيقة.

References :

- [1] R. K. Pathria and P. D. Beale, *Statistical Mechanics*, 3rd ed. Oxford, U.K.: Elsevier, 2011.
- [2] S. Friedli and Y. Velenik, *Statistical Mechanics of Lattice Systems*. Cambridge, U.K.: Cambridge Univ. Press, 2017.
- [3] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed. Hoboken, NJ, USA: Wiley, 2005.

- [4] T. Matsubara and H. Matsuda, "A lattice model of liquid helium," *Prog. Theor. Phys.*, vol. 16, no. 6, pp. 569–582, 1956.
- [5] M. Barranco, M. Pi, S. M. Gatica, E. Hernández, and J. Navarro, "A density functional for liquid ^3He based on the Aziz potential," *Phys. Rev. B*, vol. 56, no. 14, pp. 8997–9004, 1997.
- [6] G. S. Kell, G. E. McLaurin, and E. Whalley, "The second virial coefficient of helium from 0 to 500 °C by the two-temperature gas-expansion method," *J. Chem. Phys.*, vol. 68, no. 5, pp. 2199–2205, 1978.
- [7] J. J. Hurly and M. R. Moldover, "Ab initio thermophysical properties of helium," *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.*, vol. 105, no. 5, pp. 667–688, 2000.
- [8] D. M. Ceperley, "Path integrals in the theory of condensed helium," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 67, no. 2, pp. 279–355, 1995, doi: 10.1103/RevModPhys.67.279.
- [9] B. M. Axilrod and E. Teller, "Interaction of the van der Waals type between three atoms," *J. Chem. Phys.*, vol. 11, no. 6, pp. 299–300, 1943, doi: 10.1063/1.1723844.
- [10] R. A. Aziz and M. J. Slaman, "The HFD-B(He) potential for helium," *J. Chem. Phys.*, vol. 87, no. 6, pp. 3590–3599, 1987.
- [11] R. Redmer and W. Wagner, "Quantum many-body effects in dense helium: Effective interactions and thermodynamic properties," *J. Chem. Phys.*, vol. 133, Art. no. 034501, 2010.
- [12] S. V. Pilipenko, "Thermodynamics of quantum lattice gases," *J. Exp. Theor. Phys.*, vol. 126, no. 3, pp. 404–414, 2018.
- [13] J.-P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, 4th ed. Amsterdam, The Netherlands: Academic Press, 2013.
- [14] E. Mason and T. Spurling, *The Virial Equation of State*. Moscow, Russia: MIR Publishing, 1972, p. 279.
- [15] A. Michels and H. Wouters, "Isotherms of helium between 0 °C and 150 °C up to 200 Amagat," *Physica*, vol. 8, no. 8, pp. 923–932, 1941.

