Theoretical Study of The Dispersion Spectrum of A Two-Dimensional (2D) Roton Subjected To A Van Der Waals Field Generated by The Atoms of A Solid Graphite Substrate

Ali Mohsen Mostafa[*]
Dr. Nasser Ismail[**]
Dr. Badr Al-Aaraj[***]

(Received 12 / 5 / 2026. Accepted 29 / 6 / 2026)

□ ABSTRACT □

Two-dimensional systems represent a vibrant field in contemporary physical research due to their unique properties. This paper presents a theoretical investigation of a two-dimensional roton within superfluid helium adsorbed on a solid graphite substrate under the influence of the Van der Waals potential. This potential was employed to model the liquid-substrate interaction, precisely determining the solid-like layer thickness as 6.32 Å based on the equilibrium condition, alongside calculating the attraction coefficient (364.13 K.Å^3). By solving the Schrödinger equation via MATLAB, the optimal confinement parameter yielding the minimum energy state was obtained. Findings indicate that the energy reduction magnitude correlates directly with the roton's specific momentum. Furthermore, the study demonstrated a significant 8.47% decrease in the surface roton's effective mass. Graphical representations illustrated the energy shift corresponding to each momentum, providing a comparative analysis between bulk and surface states. A comprehensive thermodynamic analysis was conducted at a specific temperature, calculating density, entropy, heat capacity, and internal energy across various momenta. These results, compared with bulk parameters, rigorously proved an increased roton density near the substrate surface.

Keywords: (2D) Roton, Superfluid Helium, Graphite Substrate, Van der Waals Potential, Thermodynamic Parameters.

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

[*] **Master's Student, Faculty of Science, Latakia University(Formerly Tishreen), Latakia, Syria. ali.mostafa@latakia-univ.edu.sy**
****Professor, Faculty of Science, Latakia University(Formerly Tishreen), Latakia, Syria. Nasseraliismail@latakia-univ.edu.sy**
[***] **Professor, Faculty of Science – Latakia University (Formerly Tishreen), Latakia, Syria. badr.alaaraj@latakia-univ.edu.sy**

دراسة نظرية لطيف التشتت لروتون ثنائي الأبعاد (2D) خاضع لحقل فان دير فالس الناتج عن ذرات ركيزة الغرافيت الصلبة

علي محسن مصطفى [*]
د. ناصر اسماعيل [**]
د. بدر الأعرج [***]

(تاريخ الإيداع12 / 5 / 2026. قبل للنشر في 29 / 6 / 2026)

□ ملخّص □

تُعد الأنظمة ثنائية الأبعاد مجالاً نشطاً في الدراسات الفيزيائية المعاصرة نظراً لخصائصها الفريدة. تتناول هذه الورقة دراسة نظرية لروتون ثنائي الأبعاد في الهيليوم الفائق الممتز على ركيزة من الغرافيت الصلب تحت تأثير جهد فان دير فالس. تم استخدام هذا الجهد لنمذجة التفاعل بين السائل والركيزة، مع تحديد سماكة الطبقة شبه المتجمدة بدقة ($D_0 = 6.32Å$) بناءً على شرط الاتزان بالإضافة لحساب معامل التجاذب $\gamma_0 = 364.13K.Å^3$. تم حل معادلة شرودنجر باستخدام برنامج (MATLAB) ومن خلال ذلك تم الحصول على قيمة بارامتر الحصر الأمثل الذي يعطي أخفض قيمة للطاقة. لوحظ أن قيمة الإنخفاض ترتبط بالزخم الخاص بالروتون. بيّنت الدراسة انخفاض في الكتلة الفعالة للروتون السطحي بمقدار 8.47%. وضحت الأشكال قيمة الإنخفاض الحاصل الموافق لكل زخم مع اظهار مقارنة بين الحالتين الحجمية والسطحية. تم إجراء تحليل ترموديناميكي عند درجة حرارة $T = 1K$. شملت الحسابات كل من الكثافة، الإنتروبيا، السعة الحرارية، الطاقة الداخلية وغيرها من البارمترات لكل كمية حركة مختلفة ثم تمت المقارنة مع البارمترات الحجمية. برهنت الدراسة زيادة كثافة الروتونات قرب السطح.

الكلمات المفتاحية: روتون ثنائي الأبعاد، سائل الهيليوم الفائق، ركيزة الغرافيت، جهد فاندر–فالس، البارمترات الترموديناميكية.

حقوق النشر : مجلة جامعة اللاذقية (تشرين سابقاً)– سوريا، يحتفظ المؤلفون بحقوق النشر بموجب الترخيص CC BY–NC–SA 04

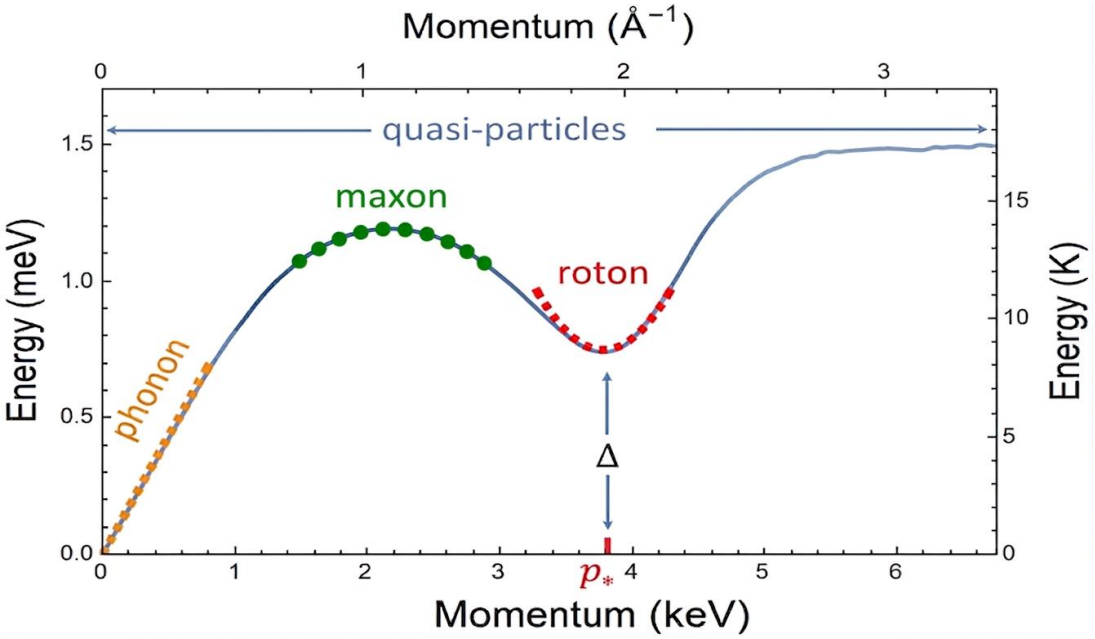
[*]طالب ماجستير، كلية العلوم، جامعة اللاذقية(تشرين سابقاً)، اللاذقية، سوريا. ali.mostafa@latakia–univ.edu.sy
[**]أستاذ، كلية العلوم، جامعة اللاذقية(تشرين سابقاً)، اللاذقية، سوريا. Nasseraliismail@latakia–univ.edu.sy
[***]أستاذ، كلية العلوم، جامعة اللاذقية(تشرين سابقاً)، اللاذقية، سوريا. badr.alaaraj@latakia–univ.edu.sy

مقدمة:

تم اكتشاف الميوعة الفائقة في الهيليوم $^4_2\mathrm{He}$ عام 1937 عن طريق التجربة بشكل مستقل من قبل الفيزيائي الروسي (P. Kapitsa) والفيزيائيين البريطانيين (John Allen) و(Don Misener). أُطلق مصطلح السائل الفائق على الطور الجديد الذي اكتشفه (Kapitsa) بهدف وصف الخصائص غير الكلاسيكية التي أبداها السائل تحت درجة حرارة تساوي $\mathrm{T} = 2.17\ \mathrm{K}$ وهي ما تعرف بنقطة لامدا (λ_point). تميزت السوائل الفائقة عن الكلاسيكية بكونها تملك لزوجة شبه معدومة مما يعطيها قدرة شبه تامة على الجريان دون احتكاك [1,2].

فيما بعد وضع الفيزيائي (L. Landau) نظرية استطاعت تفسير نتائج التجارب على الهيليوم II، فسرت هذه النظرية ظاهرة الميوعة الفائقة وأفادت بأن هناك نوعين رئيسيين من الإثارات يتشكلان ضمن السائل الفائق تحت نقطة لامدا هما الفونونات (Phonons) والروتونات (Rotons) [3].

جاءت نتائج تجارب تشتت النيوترونات لتؤكد على صحة النظرية حيث يظهر طيف الإثارات الإبتدائية للهيليوم $^4_2\mathrm{He}$ تحت نقطة لامدا كما في الشكل 1.



الشكل1: يمثل الشكل السابق منحني التشتت الخاص بالهيليوم II تحت نقطة لامدا، ويوضح ثلاث أنواع من الإثارات وهي: الفونونات (Phonons) والروتونات (Rotons) والماكسونات (Maxons). (تقاس قيمة الطاقة بواحدة K مقابل الزخم بواحدة Å أو في بعض المراجع تقاس الطاقة بواحدة (ميلي إلكترون فولت) meV مقابل الزخم بواحدة KeV).

تعطى العلاقة بين الطاقة E وكمية الحركة P لكل إثارة من الإثارات السابقة وفق العلاقات التالية:

الفونونات: $\mathrm{E_{ph}} = \mathrm{v} \times \mathrm{P}$

v: سرعة الصوت العادي في الهيليوم II وتعطى بالقيمة $\mathrm{v} \approx 240\mathrm{m.s^{-1}}$.

P: الزخم الموافق للفونون.

الماكسونات: $\mathrm{E_{max}} = \Delta_1 + \frac{(\mathrm{P}-\mathrm{P_1})^2}{2\mu_1}$

μ_1, Δ_1, P_1 تمثل البارامترات السابقة الزخم وطاقة الفجوة والكتلة الفعالة للماكسون على الترتيب وتُعيّن قيمها اعتمادا على تجارب تشتت النيوترونات.

الروتونات: $E_{rot} = \Delta_0 - \frac{(P-P_0)^2}{2\mu_0}$

P_0 : الزخم الموافق للروتون ويعطى بالقيمة 1.91 Å.

μ_0 : الكتلة الفعالة للروتون مقدرة بوحدة كتلة ذرة ^4_2He ، $(\mu_0 = 0.16m_{He})$.

Δ_0 : طاقة فجوة الروتون تعطى بالقيمة 8.62 K.[3-5]

أهمية البحث وأهدافه:

يهدف هذا البحث إلى دراسة تأثير جهد فاندرفالس الناتج عن ركيزة الغرافيت الصلبة على الروتون السطحي وكيفية استجابة طاقته لهذا الجهد ومقارنتها مع طاقته في حالة السائل الحجمي. بالإضافة لحساب بارامتراته الترموديناميكية الجديدة بعد التعديل الحاصل على طاقته ومقارنتها بالبارامترات الخاصة به في حالة السائل الحجمي. وتبرز أهمية البحث من كونه يهدف إلى بناء إطار نظري يمكن من خلاله الحصول على سماكة محددة للطبقة شبه المتجمدة وإيجاد الحل بأخذها بعين الإعتبار. بينما تميل الأبحاث الأخرى على سبيل المثال [Kruglov & Triki, 2025] : إلى التعامل مع سماكة الطبقة كمتغير خارجي يتم ضبطه ليناسب منهجية وطريقة الدراسة المعتمدة [7].

طرائق البحث ومواده:

ركيزة الغرافيت الصلبة والجهد الناتج عنها:

تتكون مادة الغرافيت من ذرات كربون مصطفة بشكل سداسي وترتبط ببعضها بروابط تساهمية قوية بينما يربط الطبقات العمودية قوى فاندرفالس الضعيفة نسبيا. ويمكن تعريفها بشكل أخر على أنها طبقات أفقية من ذرات الكربون مصطفة فوق بعضها البعض بتسلسل معين معروف ب(AB type sequence) . تفصل بينها مسافات تصل ل 3.4Å [6]. حظيت أفلام الهيليوم فائق الميوعة باهتمام بحثي مكثف نظراً لخصائصها الفريدة التي تسمح برصد ظواهر كمومية متنوعة ضمن الأطر الهندسية المحصورة (Restricted Geometries) وفي هذا السياق، أشارت دراسة (Kruglov Triki) إلى أن استقرار الظواهر الكمومية في هذه الأفلام يعتمد بشكل جوهري على هذا الحصر؛ مما يستوجب في دراستنا فرض وجود طبقة رقيقة من سائل الهيليوم الفائق ^4_2He فوق ركيزة الغرافيت. ونظراً لقوى الجذب الشديدة التي تمارسها الركيزة على ذرات الهيليوم القريبة، فإننا نفترض تشكل طبقة ممتزة شبه صلبة (Solid-like adsorbed layer) بسماكة D_0 تفصل بين الركيزة والسائل الفائق. وبينما تعتمد الدراسات الديناميكية الحديثة على قيم متغيرة لسماكة الفيلم لإيجاد الحلول الموجية، تبرز قيمة الدراسة في تحديد القيمة الفيزيائية الثابتة لهذه السماكة الناتجة عن الاتزان الهيدروستاتيكي تحت تأثير جهد الركيزة.[7]

يعطى الجهد V الجاذب الناتج عن الركيزة بالعلاقة[8] :

$$V = -\frac{C_3}{(Z-Z_0)^3} - \frac{C_5}{(Z-Z_0)^5} - \cdots \quad (1)$$

في هذه الدراسة نكتفي بالحد المسيطر من جهد الركيزة، لأن الإسهامات الأبعد تصبح ضعيفة في المنطقة المدروسة:

$$V = -\frac{C_3}{Z^3} \quad (2)$$

حيث C_3 و C_5 هما معاملا تفاعل فاندرفالس (ثنائي قطب–ثنائي قطب)، (ثنائي قطب–رباعي قطب) على الترتيب. $(Z - Z_0)$ يعبر Z_0 عن مستوي مرجع فاندرفالس وZ عن المسافة الفعلية بين الذرة ومراكز نوى الطبقة الخارجية للسطح. واعتمدنا في الدراسة على أن مستوي المرجع . $Z_0 = 0$وبهذا الشكل المبسط يمكننا التركيز على التأثير الفعلي للركيزة بالقرب من السطح.

انطلاقا من علاقة التوازن الهيدروستاتيكي[9] :

$$\nabla \mathbf{p} = -\rho(Z)\, \nabla V(Z) \qquad (3)$$

حيث يشكل شرط التوازن الهيدروستاتيكي الصلة الأساسية بين الجهد السطحي وتوزع الضغط **p** داخل السائل.

تتم الدراسة وفق المحور **Z** فقط، وبتعويض علاقة تغير الضغط بدلالة سرعة الصوت ضمن السائل نجد:

$$v^2 \frac{d\rho(Z)}{dZ} = -\rho(Z) \frac{dV(Z)}{dZ} \qquad (4)$$

علما أن v سرعة الصوت العادي في الهيليوم ‖.

وباستخدام علاقة الضغط مع سرعة الصوت نعيد صياغة المسألة بدلالة التغير في الكثافة فقط، مما يسهل علينا متابعة الأثر السطحي على طاقة فجوة الروتون.

نعبر عن التغير الحاصل بالكثافة اعتمادا على المسافة **Z** بالعلاقة:

$$\rho(Z) = \rho_0 + \delta\rho(Z) \qquad (5)$$

بفرض أن التغير الحاصل بالكثافة صغير بحيث يصلح التقريب التالي وبالمكاملة والقسمة على مربع سرعة الصوت نجد:

$$\delta\rho(Z) \approx -\frac{\rho_0}{v^2}\left(-\frac{C_3}{Z^3}\right) = \frac{\rho_0 C_3}{v^2 Z^3} \qquad (6)$$

اعتمادا على بيانات تجارب الضغط في المرجع [10] وُجد أن البارامتر الأكثر حساسية لتغيرات الضغط هو طاقة فجوة الروتونΔ_0(تتناقص مع زيادة الضغط)، بنشر طاقة الفجوة $\Delta_0(\rho)$ حسب منشور تايلور حول الكثافة الحجمية الثابتة ρ_0 وبإهمال الحدود الضئيلة جدا وتعويض العلاقة (6) السابقة نجد:

$$\Delta_0(Z) = \Delta_0(\rho_0) + \left(\frac{\partial \Delta_0}{\partial \rho}\right)_{\rho_0} \frac{\rho_0 C_3}{v^2 Z^3} \qquad (7)$$

ويظهر من العلاقة السابقة أن طاقة الفجوة هي الكمية الأكثر حساسية لتغيرات الضغط في هذا النظام.

بفرض$\tau = \rho_0 C_3$ ،وبالتعويض في العلاقة رقم (7) نصل للعلاقة:

$$\Delta_0(Z) = \Delta_0(\rho_0) + \left(\frac{\partial \Delta_0}{\partial \rho}\right)_{\rho_0} \frac{\tau}{v^2 Z^3} \qquad (8)$$

نعرف المقدار: $\left(\frac{\partial \Delta_0}{\partial \rho}\right)_{\rho_0} \frac{\tau}{v^2} = \gamma_0$ وبتعويضه في العلاقة (8) نصل إلى العلاقة:

$$\Delta_0(Z) = \Delta_0(\rho_0) + \frac{\gamma_0}{Z^3}$$

وبالأخذ بعين الإعتبار سماكة الطبقة شبه المتجمدة D_0 ، حيث أن الروتونات التي نهدف إلى دراستها تتشكل انطلاقا من الطبقة شبه المتجمدة يصبح من الضروري إدخال سماكة الطبقة ضمن الصياغة الفيزيائية السابقة، فتؤول العلاقة إلى الصيغة التالية:

$$\Delta_0(Z) = \Delta_0(\rho_0) + \frac{\gamma_0}{(Z+D_0)^3} \qquad (9)$$

وبذلك تصبح طاقة الفجوة مرتبطة بخصائص السائل وبهندسة السطح. واعتمادا على الشكل الرياضي للعلاقة $\left(\frac{\partial \Delta_0}{\partial \rho}\right)_{\rho_0} \frac{\tau}{v^2} = \gamma_0$ والذي حكما ستكون نتيجته سالبة بسبب $\left(\frac{\partial \Delta_0}{\partial \rho} < 0\right)$،نستنتج أن طاقة الفجوة المعدلة يجب أن تتناقص.

نستطيع كتابة طاقة فجوة الروتون اعتمادا على قاعدة السلسلة الرياضية بالعلاقة:

$$\frac{\partial \Delta_0}{\partial \rho} = \frac{\partial \Delta_0}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \rho} \qquad (10)$$

بتعويض مربع سرعة الصوت في العلاقة رقم (10) والعزل نصل إلى العلاقة التالية:

$$\frac{1}{v^2}\frac{\partial \Delta_0}{\partial \rho} = \frac{\partial \Delta_0}{\partial \mathbf{p}} \qquad (11)$$

بالتعويض في تعريف غاما السابق نجد:

$$\gamma_0 = \left(\frac{\partial \Delta_0}{\partial \rho}\right)_{\rho_0} \frac{\tau}{v^2} \Rightarrow \gamma_0 = \left|\frac{\partial \Delta_0}{\partial \mathbf{p}}\right| \tau$$

بتعويض قيمة كل من [8,10,11]:

$$C_3 = 183\text{meV}.\text{Å}^3, \rho_0 = 0.0218\text{Å}^{-3}, \left|\frac{\partial \Delta_0}{\partial \mathbf{p}}\right| = 0.057\,{}^{\text{K}}/_{\text{bar}}$$

حيث اعتمدنا القيمة السابقة للكثافة الموافقة لدرجة حرارة $1K$. ومع الأخذ بعين الإعتبار التحويلات بين الواحدات الحرارية والميكانيكية:

$$1\ bar = 10^5 pa، 1meV = 11.604K، 1meV = 1.602 \times 10^8\ Pa.\text{Å}^3$$

حيث: ($1meV = 10^{-3}eV$)

نجد قيمة γ_0 كالتالي:

$$\gamma_0 = 31.38\ \text{meV}.\text{Å}^3$$

يتم تحويل القيمة السابقة لواحدة $(\text{K}.\text{A}^{\circ 3})$ للتعامل معها لاحقا ضمن برنامج (MATLAB) فتصبح γ_0 تساوي:

$$\gamma_0 = 364.13\text{K}.\text{Å}^3$$

تم حساب قيمة γ_0 وظهرت كقيمة موجبة بسبب أخذ القيمة المطلقة للمقدار $\left|\frac{\partial \Delta_0}{\partial \mathbf{p}}\right|$ مما يستدعي تعديل العلاقة رقم (9) في الحسابات لاحقا، فتعطى بالشكل:

$$\Delta_0(Z) = \Delta_0(\rho_0) - \frac{\gamma_0}{(Z + \text{D}_0)^3}$$

- **حساب سماكة الطبقة المتجمدة $\mathbf{D_0}$:**

تبيّن سابقاً أن علاقة الجهد تعطى بالصيغة $\text{V}(Z) = -\frac{C_3}{Z^3}$. نُعرف القوة التي تؤثر بها الركيزة على ذرة واحدة بالعلاقة $\text{F(Z)} = -\frac{3C_3}{Z^4}$، وبفرض الدراسة في حالة التوازن يمكننا التعبير عن ضغط سائل الهيليوم عند كل نقطة بعيداً عن السطح بالعلاقة:

$$\mathbf{p}(Z) = \frac{\rho_0 C_3}{Z^3} \qquad (12)$$

لحساب سماكة الطبقة شبه المتجمدة نستعيض عن الضغط السابق بضغط التجمد لسائل الهيليوم ^4_2He وليكن $\mathbf{p}_\text{f} \approx 25.3\ bar$:

ومع اعتماد التحويلات الواحدية التالية:

$$,\ bar = 10^5 pa, 1meV = 1.602 \times 10^8\ Pa.\text{Å}^3, 1m^3 = 10^{30}\text{Å}$$

$$\text{D}_0{}^3 = \frac{\rho_0 . C_3}{\mathbf{p}_\text{f}} = 2.526 \times 10^{-28}\text{m}^3 \Rightarrow \text{D}_0 = \sqrt[3]{252.61} \approx 6.32\text{Å}$$

تبين النتيجة السابقة أن سماكة الطبقة شبه المتجمدة كمية فيزيائية ناتجة عن شرط الاتزان.

- **الإنتقال للوصف الكمي:**

تُعطى طاقة الروتون في السائل الفائق بالعلاقة . $E = \Delta_0 + \frac{(P-P_0)^2}{2\mu_0^*}$في حال أردنا الإنتقال للوصف الكمي لروتونات الهيليوم السطحية ولحل مشكلة المؤثرات المعقدة في حالة $P - P_0$، نقوم بتعديل علاقة الطاقة بحيث تصبح بالشكل:

$$E = \Delta_0(Z) + \frac{(P^2 - P_0^2)^2}{8\mu_0^* P_0^2} \qquad (13)$$

نعرف هاملتون الروتون بالعلاقة التالية:

$$\hat{H} = \widehat{\Delta_0}(Z) + \frac{\left(\widehat{P^2} - P_0^2\right)^2}{8\mu_0^* P_0^2} \qquad (14)$$

بتعويض $\hat{P} = -i\hbar\nabla$ ،وبفصل الحركة الخاصة بالروتون لاتجاهين أحدهما مواز لسطح الركيزة وليكن $P_\parallel$ واتجاه عمودي على السطح وليكن P_Z.بتعويض $\widehat{\Delta_0}(Z) = \Delta_0(\rho_0) - \frac{\gamma_0}{(\hat{Z}^3 + D_0)}$ و $\widehat{P^2} = P_\parallel^2 + \widehat{P_Z^2}$ ضمن العلاقة رقم (14) نجد:

$$\hat{H} = \Delta_0(\rho_0) - \frac{\gamma_0}{(\hat{Z} + D_0)^3} + \frac{\left(P_\parallel^2 - \hbar^2 \frac{d^2}{dZ^2} - P_0^2\right)^2}{8\mu_0^* P_0^2} \qquad (15)$$

بالتعويض في معادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن $\hat{H}\Psi(Z) = E\Psi(Z)$ نحصل على العلاقة[12] :

$$\left\{\frac{1}{8\mu_0^* P_0^2}\left[P_\parallel^2 - \hbar^2 \frac{d^2}{dZ^2} - P_0^2\right]^2 - \frac{\gamma_0}{(\hat{Z} + D_0)^3}\right\}\Psi(Z) = \left(E - \Delta_0(\rho_0)\right)\Psi(Z) \qquad (16)$$

وبذلك نحصل على معادلة شرودنجر للروتون السطحي الخاضع لتأثير الركيزة.

بفرض أن الدراسة تحصل في حال $P_0 \approx P_\parallel$، بحساب المقدار $P_\parallel^2 - P_0^2$ وتعويضه في المعادلة السابقة نحصل على العلاقة:

$$\frac{1}{8\mu_0^* P_0^2}\frac{\hbar^4 d^4}{dZ^4} + \frac{\hbar^2(P_0 - P_\parallel)}{2\mu_0^* P_0}\frac{d^2}{dZ^2} + \frac{(P_0 - P_\parallel)^2}{2\mu_0^*} + \frac{\gamma_0}{(Z + D_0)^3}\Psi(Z) = (E - \Delta_0)\Psi(Z) \qquad (17)$$

تعطى الطاقة التقريبية اعتمادا على مبدأ التغاير بالعلاقة التالية[13] :

$$E_{approx} = E - \Delta_0 = \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{\int_0^\infty \Psi^*(Z)\hat{H}\,\Psi(Z)dz}{\int_0^\infty \Psi^*(Z)\Psi(Z)dz} \qquad (18)$$

نظرا لصعوبة الحصول على حل تحليلي دقيق يُعد مبدأ التغاير أداة مناسبة لاستخراج الطاقة الدنيا.

يتم اعتماد التابع الموجي التالي $\Psi(Z) = AZ^2e^{-\beta Z}$.علما أن التابع السابق تم اختياره بحيث يحقق السلوك الفيزيائي المتوقع عند الحدود ويحوي على وسيط تغايري واحد β يكفي لوصف درجة التمركز قرب السطح.

نجد بعد الحساب أن:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \int_0^\infty |\Psi(Z)|^2 dZ = \frac{3A^2}{4\beta^5}$$

نُجزّئ الهاملتوني السابق لأربعة أجزاء ونقوم بحساب كل جزء على حدى:

$$\widehat{\mathrm{H}} = \frac{1}{8\mu_0^* \mathrm{P}_0^2}\frac{\hbar^4 \mathrm{d}^4}{\mathrm{d}Z^4} + \frac{\hbar^2(\mathrm{P}_0 - \mathrm{P}_\parallel)}{2\mu_0^* \mathrm{P}_0}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}Z^2} + \frac{(\mathrm{P}_0 - \mathrm{P}_\parallel)^2}{2\mu_0^*} - \frac{\gamma_0}{(Z + \mathrm{D}_0)^3} \qquad (19)$$

ويسمح التقسيم السابق بعزل إسهام كل حد على حدى، مما يوضح الدور النسبي للحركة والجهد والحصر في تحديد الطاقة.

i. **القيمة المتوقعة للجزء الأول:**

بحساب المشتق الثاني والرابع للتابع الموجي واعتمادا على تكامل تابع غاما نحصل على:

$$\langle\Psi|\widehat{\mathrm{H}_1}|\Psi\rangle = \int_0^\infty \Psi^*(Z)\widehat{\mathrm{H}_1}\,\Psi(Z)\mathrm{d}z = \frac{3\mathrm{A}^2\hbar^4}{32\mu\mathrm{P}_0^2\beta} \qquad (20)$$

يمثل هذا الحد مساهمة الحد الحركي الرئيسي في الطاقة المتوقعة.

ii. **القيمة المتوقعة للجزء الثاني:**

$$\langle\Psi|\widehat{\mathrm{H}_2}|\Psi\rangle = \int_0^\infty \Psi^*(Z)\widehat{\mathrm{H}_2}\,\Psi(Z)\mathrm{d}z = \frac{\mathrm{A}^2\hbar^2(\mathrm{P}_\parallel - \mathrm{P}_0)}{8\mu_0^*\mathrm{P}_0\beta^3} \qquad (21)$$

يعكس هذا الحد تأثير التموضع العمودي للتابع الموجي.

iii. **القيمة المتوقعة للجزء الثالث (حد ثابت):**

$$\langle\Psi|\widehat{\mathrm{H}_3}|\Psi\rangle = \int_0^\infty \Psi^*(Z)\widehat{\mathrm{H}_3}\,\Psi(Z)\mathrm{d}Z = \frac{(\mathrm{P}_0 - \mathrm{P}_\parallel)^2}{2\mu_0^*}\frac{3\mathrm{A}^2}{4\beta^5} \qquad (22)$$

يظهر الشكل طيف الروتونات القياسي ضمن الحد السابق.

iv. **القيمة المتوقعة للجزء الرابع (حد الجهد):**

$$\langle\Psi|\widehat{\mathrm{H}_4}|\Psi\rangle = \int_0^\infty |\Psi^*|^2\frac{-\gamma_0}{(Z + \mathrm{D}_0)^3}\mathrm{d}Z = -\mathrm{A}^2\gamma_0\int_0^\infty \frac{Z^4\mathrm{e}^{-2\beta Z}}{(Z + \mathrm{D}_0)^3}\mathrm{d}Z \qquad (23)$$

ويعبر هذا الحد عن متوسط تأثير جهد الركيزة على الحالة المتموضعة قرب السطح.

نقوم بحل التكامل $\mathrm{I} = \int_0^\infty \frac{\mathrm{Z}^4\mathrm{e}^{-2\beta\mathrm{Z}}}{(\mathrm{Z}+\mathrm{D}_0)^3}\mathrm{dZ}$.بفرض $\mathrm{u} = Z + \mathrm{D}_0$ متحول جديد، وبعد التعويض والحل نصل للتكامل التالي:

$$\mathrm{I} = \mathrm{e}^{2\beta\mathrm{D}_0}\left[\int_\mathrm{D}^\infty (\mathrm{u} - 4\mathrm{D}_0)\mathrm{e}^{-2\beta\mathrm{u}}\mathrm{du} + \int_\mathrm{D}^\infty \frac{6{\mathrm{D}_0}^2}{\mathrm{u}}\mathrm{e}^{-2\beta\mathrm{u}}\mathrm{du} - \int_\mathrm{D}^\infty \frac{4{\mathrm{D}_0}^3}{\mathrm{u}^2}\mathrm{e}^{-2\beta\mathrm{u}}\mathrm{du} + \int_\mathrm{D}^\infty \frac{{\mathrm{D}_0}^4}{\mathrm{u}^3}\mathrm{e}^{-2\beta\mathrm{u}}\mathrm{du}\right] \qquad (24)$$

نقوم بإجراء تغيير للتكامل بحيث يظهر لدينا وسيط الحصر اللابعدي $\alpha_0 = 2\beta\mathrm{D}_0$.

بحل كل تكامل على حدى اعتمادا على طريقة التجزئة ودالة التكامل الأسي $\mathrm{E_n(Z)} = \int_\mathrm{z}^\infty \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{t}}}{\mathrm{t}^\mathrm{n}}\mathrm{dt}$ نصل الى الصيغة التالية:[14]

$$\mathrm{I} = \left(\frac{{\mathrm{D}_0}^2}{{\alpha_0}^2} - \frac{3{\mathrm{D}_0}^2}{\alpha_0}\right) + \mathrm{e}^{\alpha_0}\left[6{\mathrm{D}_0}^2\mathrm{E}_1(\alpha_0) - 4{\mathrm{D}_0}^2\mathrm{E}_2(\alpha_0) + {\mathrm{D}_0}^2\mathrm{E}_3(\alpha_0)\right] \qquad (25)$$

بالتعويض في العلاقة رقم (23) نحصل على:

$$\langle\Psi|\widehat{\mathrm{H}_4}|\Psi\rangle = -\mathrm{A}^2\gamma_0\mathrm{I} \qquad (26)$$

بتعويض (20) و (21) و (22) و (26) في العلاقة رقم (18) نحصل على:

$$E - \Delta_0 = \frac{\frac{3A^2\hbar^4}{32\mu_0^* P_0^2 \beta} + \frac{A^2\hbar^2(P_\parallel - P_0)}{8\mu_0^* P_0 \beta^3} + \frac{3A^2(P_0 - P_\parallel)^2}{8\mu_0^* \beta^5}}{\frac{3A^2}{4\beta^5}} - \frac{A^2\gamma_0 I}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \qquad (27)$$

بالتعويض وترتيب الحدود نصل للمعادلة:

$$\mathbf{E - \Delta_0 = \frac{\hbar^4}{2^7 \mu_0^* P_0^2 {D_0}^4} {\alpha_0}^4 - \frac{\gamma_0}{24 {D_0}^3}\left[{\alpha_0}^3 - 3{\alpha_0}^4 + {\alpha_0}^5 e^{\alpha_0}[6E_1(\alpha_0) - 4E_2(\alpha_0) + E_3(\alpha_0)]\right] + \frac{\hbar^2(P_\parallel - P_0)}{24\mu_0^* P_0 {D_0}^2}{\alpha_0}^2 + \frac{(P_0 - P_\parallel)^2}{2\mu_0^*}} \qquad (28)$$

تمثل هذه العلاقة الصيغة النهائية لطيف التشتت للروتون السطحي بعد أخذ تأثير الركيزة في الحسبان. تُعتبر المعادلة السابقة المعادلة الرياضية المعبرة عن طيف التشتت لروتون ثنائي الأبعاد خاضع لحقل فاندرفالس ناتج عن ذرات ركيزة الغرافيت الصلبة. يمكن تقسيم المعادلة السابقة إلى الحدود الرئيسية التالية:

حد الانزياح الطاقي $(E - \Delta_0)$:

يُمثل الفرق بين طاقة الحالة المقيدة E وطاقة فجوة الروتون في السائل الحر (Bulk) التي نرمز لها بـ Δ_0.ومن خلاله يمكننا تحديد الانزياح في طاقة الفجوة الناتج عن تأثير جهد ركيزة الغرافيت الصلبة. ويمثل المؤشر المباشر على مقدار الإبتعاد عن الحالة الحجمية نتيجة تأثير الركيزة.

حد طاقة الحصر المكاني(Spatial Localization Energy) :

$$\frac{\hbar^4}{2^7 \mu_0^* P_0^2 {D_0}^4}{\alpha_0}^4$$

يُعبر عن زيادة الطاقة الحركية العمودية الناتجة عن تموضع الدالة الموجية للروتون في حيّز ضيق فوق الطبقة المتجمدةD_0 . يرتكز هذا الحد على مبدأ الشك لهايزنبرج (Heisenberg)؛ حيث يؤدي حصر الإثارة في مسافة Z ضيقة إلى رفع طاقة نقطة الصفر (Zero-point energy) .ويزداد اسهام هذا الحد كلما ازدادت درجة التمركز المكاني للروتون قرب السطح.

حد تفاعل فان دير فالس (Van der Waals Potential Term):

$$\frac{\gamma_0}{24 {D_0}^3}\left[{\alpha_0}^3 - 3{\alpha_0}^4 + {\alpha_0}^5 e^{\alpha_0}[6E_1(\alpha_0) - 4E_2(\alpha_0) + E_3(\alpha_0)]\right]$$

يعكس هذا الحد متوسط الجذب طويل المدى بين الهيليوم والركيزة. يمثل γ_0 دالة الاستجابة الميكانيكية للهيليوم تجاه الضغط المحلي الذي تولده الركيزة. يمثل α_0 بارامتر الحصر الذي يحدد مدى تمركز الدالة الموجية للروتون عمودياً على السطح. التكاملات الأسية السابقة تعبر عن التداخل بين الجهد الناتج عن الركيزة الذي يتلاشى مع المسافة والتابع الموجي للروتون أي أنها تعبر عن متوسط الجهد الذي يستشعره الروتون في المنطقة الفعالة الموجود بها.

حد الإقتران الحركي–المكاني:

$$+\frac{\hbar^2(P_{\|}-P_0)}{24\mu_0^* P_0 {D_0}^2}{\alpha_0}^2$$

يعبر الحد السابق عن الاستجابة الهيكلية للروتون بسبب وجود حدود ميكانيكية (الطبقة المتجمدة D_0). حيث يعبر الحد $(P_{\|}-P_0)$ عن الانحراف عن الزخم. يعكس ${D_0}^2$ يعكس تأثير المسافة حيث كلما قلت سماكة الطبقة الصلبة زاد تأثير هذا الحد.

علاقة التشتت الديناميكية للروتون في البعدين:

$$\frac{(P_0-P_{\|})^2}{2\mu_0^*}$$

توضح العلاقة السابقة أنه رغم وجود الجذب الناتج عن الركيزة إلا أن الروتون ثنائي الأبعاد يحتفظ بسلوكه المميز وطبيعته شبه الجسيمية بوجود قاع طاقي عند زخم P_0 مع تعديل في كتلته الفعالة بسبب وجود التفاعلات عند السطح μ_0^* ويساهم الحد السابق في وصف كيف يستجيب الروتون عند إعطائه زخم جانبي $P_{\|}$.

باعتماد برنامج MATLAB لحل هذه المعادلة ضمن قيم للوسيط ألفا ما بين $(1\ ,\ 15)$ مع الأخذ بعين الإعتبار عدة قيم للزخم الجانبي الخاص بالروتون $P_{\|}$:

- $\mathbf{P_{\|}=P_0}$
- $\mathbf{P_{\|}=1.01P_0}$
- $\mathbf{P_{\|}=1.02P_0}$

(تحصل حركة الروتون في مستوي ثنائي الأبعاد (X,Y) لذلك يمكننا كتابة الزخم الموازي $P_{\|}$ مباشرة P_{0_S} مع الترميز لكل حالة مدروسة على حدي)

بعد حل المعادلة السابقة باستخدام برنامج ماتلاب نجد ما يلي:

المنحني الأول الموافق للخط الأسود في الشكل 2 $(P_{0_{s1}}=1.00P_0)$:

i. $\min(E-\Delta_0)=-0.17252\ \mathrm{K} \Longrightarrow \Delta_{0_{s1}}=8.62-0.17252=8.44748\ \mathrm{K}$

ii. $\alpha_0=5.19510$

ويُظهر هذا المنحنى مقدار الانزياح الطاقي الموافق لهذه القيمة من الزخم.

المنحني الثاني الموافق للخط الأزرق في الشكل 2 $(P_{0_{s2}}=1.01P_0)$:

i. $\min(E-\Delta_0)=-0.15870\ \mathrm{K} \Longrightarrow \Delta_{0_{s2}}=8.62-0.15870=8.46130\ \mathrm{K}$

ii. $\alpha_0=5.19510$

ويؤكد هذا السلوك أن طاقة الفجوة تستجيب لتغير الزخم مع بقاء البنية العامة للعلاقة محفوظة.

المنحني الثالث الموافق للخط الأحمر في الشكل 2 $(P_{0_{s3}}=1.02P_0)$:

i. $\min(E-\Delta_0)=-0.11726\ \mathrm{K} \Longrightarrow \Delta_{0_{s3}}=8.62-0.11726=8.50274\ \mathrm{K}$

ii. $\alpha_0=5.19510$

ويبين هذا المنحنى الاتجاه نفسه، مع اختلاف مقدار الانخفاض في الطاقة تبعًا لقيمة الزخم المختارة.

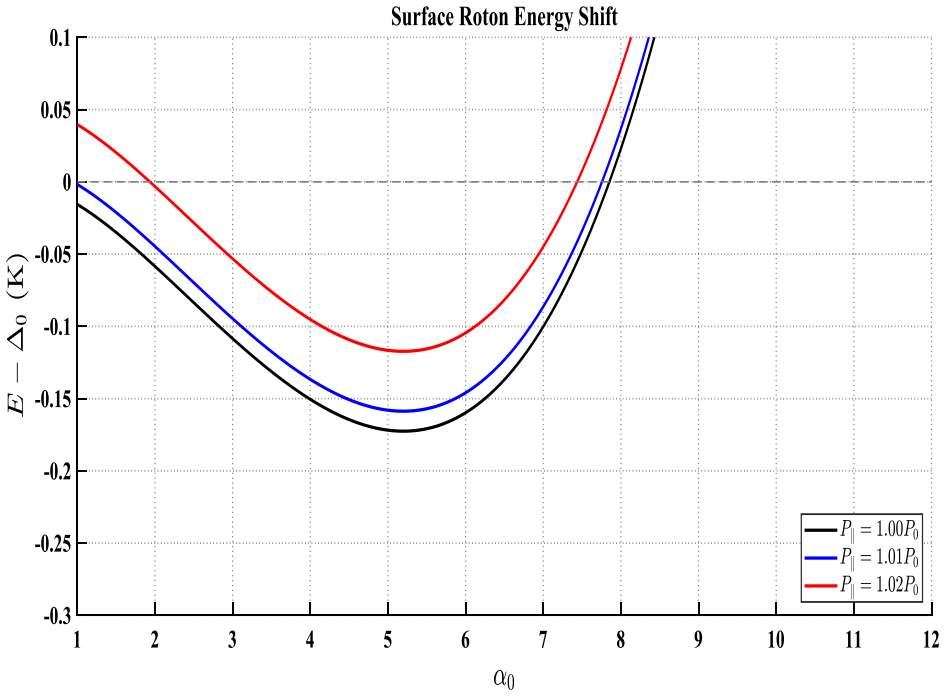
الكتلة الفعالة السطحية الجديدة اعتمادا على الزخم السابق هي:

$$\mu_{0_S}^*=0.14644505\mathrm{m_{He}}$$

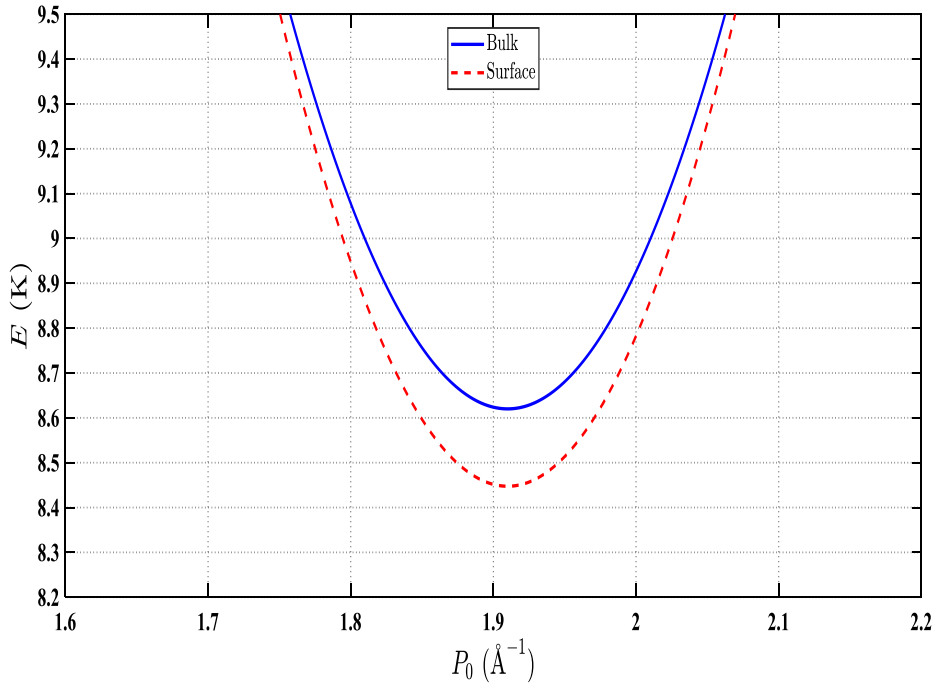
ويشير هذا التغير إلى أن تأثير الركيزة يمتد من الطاقة إلى إعادة تنظيم الاستجابة الديناميكية للروتون.

نسبة النقص في الكتلة الفعالة هي: 8.4718%.

وتعد هذه النسبة مؤشرًا كميًا واضحًا على مقدار التعديل الذي أحدثه الحصر السطحي في الخصائص الفعالة للروتون.



الشكل 2: يوضح هذا الشكل قيمة الإنخفاض الحاصلة في طاقة فجوة الروتون نتيجة تأثره بجهد الركيزة. يظهر الشكل ثلاثة خطوط كل منها يعبر عن زخم مختلف للروتون وكيفية استجابة التغير في طاقة الفجوة للتغير في الزخم. نلاحظ أن أكبر انخفاض في طاقة الفجوة يوافق الحالة التي يمتلك بها الروتون السطحي نفس زخم الروتون الحجمي القياسي والموافق للمنحني الملوّن باللون الأسود $\mathbf{P_{0_{s1}} = P_0}$.نلاحظ أن زيادة الزخم تؤدي إلى انخفاض أقل في طاقة الفجوة وهو ما يوضحه كل من المنحنيين الأزرق والأحمر الموافقين للحالتين $\mathbf{P_{0_{s2}} = 1.01P_0}$ و $\mathbf{P_{0_{s3}} = 1.02P_0}$ على الترتيب. تَبيّن أن قيمة بارامتر الحصر تبقى ثابتة بالنسبة للمنحنيات السابقة وتعطى قيمته ب $\boldsymbol{\alpha_0 = 5.19510}$. وتؤكد هذه المقارنة أن تأثير الركيزة يكون أوضح عند القيم القريبة من الزخم المرجعي للروتون الحجمي.



الشكل 3: يظهر الشكل مقارنة بين طاقة فجوة الروتون الحجمي وطاقة فجوة الروتون السطحي الخاضع لجهد الركيزة. يُبيّن الشكل الإنخفاض الحاصل في طاقة فجوة الروتون، حيث كانت تعطى طاقة فجوة الروتون الحجمي بالقيمة $\Delta_0 = 8.62$ K بينما طاقة فجوة الروتون السطحي أصبحت $\Delta_S = 8.44748$ K حيث تَبيّن أن الإنخفاض كان بمقدار 0.17252 K. وتوضح هذه المقارنة أن الروتون السطحي يمتلك طاقة فجوة أصغر من الروتون الحجمي، بما يتفق مع تأثير الجذب السطحي والحصر الهندسي.

البارمترات الترموديناميكية للروتون السطحي:

ستتم الحسابات بالنسبة للروتون السطحي السابق الخاضع لجهد ركيزة الغرافيت عند درجة حرارة مساوية $T = 1$ K. إذا ما قارنا طاقة الفجوة اللازمة لتشكيل الروتون $\Delta_S = 8.44748$ K بدرجة الحرارة التي تتم الدراسة عندها نجدها كبيرة مقارنة بها بالتالي يمكننا اعتماد توزع بولتزمان عوضاً عن توزع بوز–اينشتاين. طاقة الفجوة أكبر بكثير من الطاقة الحرارية الموافقة لدرجة الحرارة التي تتم عندها الدراسة وهذا ما يدعم استخدامنا للتوزيع السابق.

سيتم حساب البارمترات التالية (الكثافة السطحية–الطاقة الحرة السطحية–الإنتروبيا السطحية–الطاقة الداخلية السطحية–السعة الحرارية السطحية–المسافة الوسطى بين الروتونات السطحية–طول موجة دي–برولي للروتون السطحي) حيث تمثل هذه الكميات مجتمعة صورة شاملة للاستجابة الإحصائية للروتون السطحي تحت تأثير الجهد الخارجي.

نقوم بالحسابات السابقة من أجل ثلاث حالات:

i. $P_{0_{s1}} = P_0$ الموافقة للزخم $\Delta_{0_{s1}} = 8.44748$ K

ii. $P_{0_{s2}} = 1.01P_0$ الموافقة للزخم $\Delta_{0_{s2}} = 8.46130$ K

iii. $P_{0_{s3}} = 1.02P_0$ الموافقة للزخم $\Delta_{0_{s3}} = 8.50274$ K

مع الأخذ بعين الإعتبار أن الكتلة الفعالة للروتون السطحي ثابتة للحالات الثلاثة السابقة وتعطى بالقيمة التالية:
$\mu_{0_s}^* = 0.14644505 m_{He} = 9.7334 \times 10^{-28} Kg$.ونبدأ بالحالة الموافقة للقيمة الأولى من الزخم بوصفها حالة مرجعية للمقارنة.

الحالة الأولى:

$\Delta_{0_{s1}} = 8.44748$ K الموافقة للزخم $P_{0_{s1}} = P_0$

- **الكثافة السطحية:**

تعطى كثافة الروتونات السطحية اعتمادا على توزع بولتزمان بالعلاقة:

$$n_{0_{s1}} = \frac{P_{0_{s1}} \sqrt{\mu_{0_s}^* k_B T}}{(2\pi)^{1/2} \cdot \hbar^2} \cdot e^{-\frac{\Delta_{0_{s1}}}{k_B T}}$$

$$n_{0_{s1}} = \frac{P_{0_{s1}} \sqrt{\mu_{0_s}^* k_B T}}{(2\pi)^{1/2} \cdot \hbar^2} \cdot e^{-\frac{\Delta_{0_{s1}}}{k_B T}} = 1.7959 \times 10^{15}\, m^{-2}$$

ويعكس هذا المقدار عدد الروتونات المتشكلة على السطح ضمن شروط الدراسة الحرارية الحالية. الحد الأسي $\left(e^{-\frac{\Delta_{0_{s1}}}{k_B T}}\right)$ هو الحد الأساسي الذي يوضح كيفية تشكل الروتونات في السطح ونلاحظ أنه يعتمد بشكل رئيسي على درجة الحرارة وعلى طاقة الفجوة، وبما أن الدراسة تعتمد نفس درجة الحرارة لكل من الروتون الحجمي والسطحي يبقى العامل الرئيسي الذي يحدد كثافة الروتونات هو طاقة الفجوة. وبما أن $\Delta_s < \Delta_{bulk}$ فإن هذا الحد يكون أكبر بكثير للسطح منه للحجم مما يفسر زيادة كثافة الروتونات السطحية مقارنة بكثافة الروتونات الحجمية.

- **الطاقة الحرة السطحية:**

ترتبط الطاقة الحرة بالكثافة السطحية في الإحصاء الكلاسيكي بالعلاقة التالية:

$$F_{0_{s1}} = -n_s k_B T = -\frac{P_{0_{s1}} \sqrt{\mu_{0_s}^* k_B T}}{\sqrt{2\pi}\hbar^2} (k_B T) e^{-\frac{\Delta_{0_{s1}}}{k_B T}}$$

بالتعويض:

$$F_{0_{s1}} = -\frac{P_{0_{s1}} \sqrt{\mu_{0_s}^* k_B T}}{\sqrt{2\pi}\hbar^2} (k_B T) e^{-\frac{\Delta_{0_{s1}}}{k_B T}} = -2.4794 \times 10^{-8} \frac{J}{m^2}$$

وتبين هذه الكمية مقدار الاستقرار الحراري النسبي للنظام السطحي.

- **الإنتروبيا السطحية:**

تعرف الإنتروبيا على أنها القيمة السالبة لمشتقة الطاقة الحرة بالنسبة لدرجة الحرارة:

$$S_{0_{s1}} = -\left(\frac{\partial F_{0_{s1}}}{\partial T}\right)$$

بالتعويض:

$$S_{0_{s1}} = k_B n_{0_{s1}} \left[1 + \frac{1}{2} + \frac{\Delta_{0_{s1}}}{k_B T}\right] = n_{0_{s1}} k_B \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta_{0_{s1}}}{k_B T}\right) = 2.4664 \times 10^{-7} \frac{J}{K.\, m^2}$$

وتعبر الإنتروبيا عن درجة تعدد الحالات الممكنة التي يمكن أن يشغلها النظام عند نفس الشروط.

- **الطاقة الداخلية السطحية:**

ترتبط الطاقة الداخلية بالطاقة الحرة والإنتروبيا عبر علاقة جيبس–هلمهولتز:

$$U_{0_{s1}} = F_{0_{s1}} + TS_{0_{s1}}$$

$$U_{0_{s1}} = n_{0_{s1}} k_B T \left(\frac{1}{2} + \frac{\Delta_{0_{s1}}}{k_B T}\right) = 2.2184 \times 10^{-7} \frac{J}{m^2}$$

وتجمع هذه الكمية بين الإسهام الطاقي المرتبط بالفجوة والإسهام الحركي الناتج عن التوزع الحراري.

- **السعة الحرارية السطحية:**

تعرف السعة الحرارية على انها مشتقة الطاقة الداخلية بالنسبة لدرجة الحرارة:

$$C_{0_{s1}} = \frac{\partial U_{0_{s1}}}{\partial T}$$

$$C_{0_{s1}} = n_{0_{s1}} k_B \left[\frac{3}{4} + \frac{\Delta_{0_{s1}}}{k_B T} + \left(\frac{\Delta_{0_{s1}}}{k_B T}\right)^2\right] = 1.9973 \times 10^{-6} \frac{J}{K.\,m^2}$$

تبين السعة الحرارية مدى استجابة النظام لتغير درجة الحرارة ضمن المجال المدروس.

- **المسافة الوسطى بين الروتونات السطحية:**

$$d_1 \approx \frac{1}{\sqrt{n_{0_{s1}}}} \approx \frac{1}{\sqrt{1.79598 \times 10^{15}}} \approx 235.96\ \text{Å}$$

وتؤكد هذه النتيجة أن الروتونات السطحية تبقى متباعدة نسبيًا، ما يمكننا من وصفها كغاز ثنائي الأبعاد ضعيف الكثافة.

- **طول موجة دي–برولي للروتون السطحي:**

$$\lambda_{R1} = \frac{h}{P_{0_{s1}}} = 3.2897\ \text{Å}$$

تعبر النتيجة السابقة عن الامتداد الفراغي للتابع الموجي للروتون عند الزخم الموافق للقيمة $P_{0_{s1}}$.

الحالة الثانية:

$\Delta_{\mathbf{0_{s2}}} = 8.46130$ K الموافقة للزخم $P_{0_{s2}} = 1.01P_0$

- **الكثافة السطحية:**

$$n_{0_{s2}} = \frac{P_{0_{s2}} \sqrt{\mu^*_{0_s} k_B T}}{(2\pi)^{1/2} \cdot \hbar^2} \cdot e^{-\frac{\Delta_{0_{s2}}}{k_B T}} = 1.7891 \times 10^{15}\ m^{-2}$$

- **الطاقة الحرة السطحية:**

$$F_{0_{s2}} = -n_{0_{s2}} k_B T = -\frac{P_{0_{s2}} \sqrt{\mu^*_{0_s} k_B T}}{\sqrt{2\pi}\hbar^2} (k_B T) e^{-\frac{\Delta_{0_{s2}}}{k_B T}} = -2.4700 \times 10^{-8} \frac{J}{m^2}$$

- **الإنتروبيا السطحية:**

$$S_{0_{s2}} = k_B n_{0_{s2}} \left[1 + \frac{1}{2} + \frac{\Delta_{0_{s2}}}{k_B T}\right] = n_{0_{s2}} k_B \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta_{0_{s2}}}{k_B T}\right) == 2.4604 \times 10^{-7} \frac{J}{K.\,m^2}$$

- **الطاقة الداخلية السطحية:**

$$U_{0s2} = n_{0s2} k_B T \left(\frac{1}{2} + \frac{\Delta_{0s2}}{k_B T}\right) = 2.2134 \times 10^{-7} \frac{J}{m^2}$$

- **السعة الحرارية السطحية:**

$$C_{0s2} = n_{0s2} k_B \left[\frac{3}{4} + \frac{\Delta_{0s2}}{k_B T} + \left(\frac{\Delta_{0s2}}{k_B T}\right)^2\right] = 1.9972 \times 10^{-6} \frac{J}{K.m^2}$$

- **المسافة الوسطى بين الروتونات السطحية:**

$$d_2 = \left(n_{0s2}\right)^{-1/2} = 236.4 \text{ Å}$$

- **طول موجة دي–برولي للروتون السطحي:** $\lambda_{R2} = \frac{h}{P_{0s2}} = 3.2571 \text{ Å}$

الحالة الثالثة:

$\Delta_{0s3} = 8.50274$ K الموافقة للزخم $P_{0s3} = 1.02 P_0$

- **الكثافة السطحية:**

$$n_{0s3} = \frac{P_{0s3}\sqrt{\mu_{0s}^* k_B T}}{(2\pi)^{1/2} \cdot \hbar^2} \cdot e^{-\frac{\Delta_{0s3}}{k_B T}} = 1.7335 \times 10^{15} \, m^{-2}$$

- **الطاقة الحرة السطحية:**

$$F_{0s3} = -n_{0s3} k_B T = -\frac{P_{0s3}\sqrt{\mu_{0s}^* k_B T}}{\sqrt{2\pi}\hbar^2} (k_B T) e^{-\frac{\Delta_{0s3}}{k_B T}} = -2.3932 \times 10^{-8} \frac{J}{m^2}$$

- **الإنتروبيا السطحية:**

$$S_{0s3} = k_B n_{0s3} \left[1 + \frac{1}{2} + \frac{\Delta_{0s3}}{k_B T}\right] = n_{0s3} k_B \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta_{0s3}}{k_B T}\right) == 2.3938 \times 10^{-7} \frac{J}{K.m^2}$$

- **الطاقة الداخلية السطحية:**

$$U_{0s3} = n_{0s3} k_B T \left(\frac{1}{2} + \frac{\Delta_{0s3}}{k_B T}\right) = 2.1546 \times 10^{-7} \frac{J}{m^2}$$

- **السعة الحرارية السطحية:**

$$C_{0s3} = n_{0s3} k_B \left[\frac{3}{4} + \frac{\Delta_{0s3}}{k_B T} + \left(\frac{\Delta_{0s3}}{k_B T}\right)^2\right] = 1.9517 \times 10^{-6} \frac{J}{K.m^2}$$

- **المسافة الوسطى بين الروتونات السطحية:**

$$d = \left(n_{0s3}\right)^{-1/2} = 240.2 \text{ Å}$$

- **طول موجة دي–برولي للروتون السطحي:**

$$\lambda_{R3} = \frac{h}{P_{0s3}} = 3.2252 \text{ Å}$$

لغرض المقارنة، ننتقل الآن إلى الحالة الحجمية من أجل إيضاح الفارق بين السلوك السطحي والسلوك الحجمي.

البارمترات الترموديناميكية للروتون الحجمي[15] :

الفرق بين الصياغتين ثنائية الأبعاد (2D) وثلاثية الأبعاد (3D) يعود أساسًا إلى اختلاف بُعد التكامل في فضاء الطور، مما يؤدي إلى تغيير في كثافة الحالات (Density of states) وبالتالي في الصيغ الترموديناميكية المشتقة منها. في المقابل تبقى المقاييس الحرارية والكمومية الأساسية مثل $k_B T$ و $\hbar$ ثابتة، بينما يظهر الاختلاف فقط من خلال البنية الهندسية لفضاء الطور. وسنعتمد القيم التالية في حساباتنا:

$$\Delta_0 = 8.62\ \text{K}$$
$$P_0 = 1.91\ \text{Å} = 2.0142 \times 10^{-24}\ \text{kg·m/s}$$
$$\mu_0^* = 1.0634 \times 10^{-27}\ \text{kg} = (0.16 \times m_{He})$$
$$k_B = 1.3806 \times 10^{-23}\ \text{J/K}$$
$$\hbar = 1.0546 \times 10^{-34}\ \text{J·s}$$
$$T = 1\ \text{K}$$

- **الكثافة العددية الحجمية:**

وتعبر عن عدد الروتونات المتشكلة في واحدة الحجم وتعطى بالعلاقة:

$$n_0 = \frac{2p_0^2\sqrt{\mu_0^* k_B T}}{(2\pi)^{3/2}\hbar^3} e^{-\frac{\Delta_0}{k_B T}}$$
$$\approx 5.32 \times 10^{28} \times 1.8 \times 10^{-4} \approx 9.60 \times 10^{24}\ \text{m}^{-3}$$

- **الطاقة الحرة الحجمية:**

نعبر عنها بالعلاقة التالية:

$$F_0 = -n_0 k_B T = -(9.60 \times 10^{24}) \times (1.3806 \times 10^{-23}) \times 1.0 \approx -132.53\ \text{J/m}^3$$

- **الإنتروبيا الحجمية:**

تعبر الإنتروبيا عن كل الاحتمالات الكوانتية الممكنة التي يمكن لنظام ما أن يشغلها:

$$S_0 = n_0 k_B \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta_0}{k_B T}\right) = (9.60 \times 10^{24} \times 1.3806 \times 10^{-23}) \times (1.5 + 8.62)$$
$$\approx 1341.2\ \text{J/(K·m}^3\text{)}$$

- **الطاقة الداخلية الحجمية:**

تعبر عن الطاقة الكلية الموجودة في النظام (طاقة الفجوة والحركة) وتعطى بالعلاقة:

$$U_0 = n_0 \left(\Delta_0 k_B + \frac{1}{2} k_B T\right)$$
$$= 9.60 \times 10^{24} \times (8.62 \times 1.3806 \times 10^{-23} + 0.5 \times 1.3806 \times 10^{-23})$$
$$\approx 1208.7\ \text{J/m}^3$$

- **السعة الحرارية الحجمية:**

تعبر السعة الحرارية الحجمية عن درجة الحرارة اللازمة لرفع درجة حرارة متر مكعب من الروتونات درجة مئوية واحدة.

$$C_0 = n_0 k_B \left[\frac{3}{4} + \frac{\Delta_0}{k_B T} + \left(\frac{\Delta_0}{k_B T}\right)^2\right] = 132.53 \times (0.75 + 8.62 + 8.62^2) \approx 11090.2\ \text{J/(K·m}^3\text{)}$$

- **المسافة الوسطى بين الروتونات:**

تعطى المسافة بين الروتونات بالعلاقة التالية:

$$d = (n_0)^{-1/3} = (9.60 \times 10^{24})^{-1/3} \approx 4.70 \times 10^{-9}\ \text{m} \approx 47\ \text{Å}$$

- **طول موجة دي–برولي λ_R:**

يعطى طول موجة دي–برولي للروتون بالعلاقة التالية: $\lambda_R = \frac{h}{P_0} = 3.2897\ \text{Å}$

النتائج و المناقشة:

وفي ضوء التحليل النظري والحسابات العددية السابقة، يمكن تلخيص أهم النتائج التي توصلنا إليها كما يلي:

- أظهرت هذه الدراسة أن جهد فان دير فالس الناتج عن ركيزة الغرافيت الصلبة يُحدث تأثيرًا ملحوظًا على طيف تشتت الروتون ثنائي الأبعاد، حيث يؤدي إلى انخفاض في طاقة فجوة الروتون لتصبح قيمتها $\Delta_{0_{S1}} =$ 8.44748 K مقارنةً بالحالة الحجمية $\Delta_0 =$ 8.62 K، مع الحفاظ على البنية العامة المميزة لعلاقة التشتت.
- تم حساب المعامل γ_0 عبر العلاقة $\gamma_0 = \left|\frac{\partial \Delta_0}{\partial \mathbf{p}}\right| \tau$ ،حيث يعبر المقدار $\tau = \rho_0 . C_3$ عن الضغط الميكروسكوبي الناشئ عن جذب الركيزة. وتم التوصل للقيمة $\gamma_0 = 364.13\ K.\text{Å}$.
- تم استنتاج سماكة الطبقة شبه المتجمدة المتشكلة بسبب تأثير جهد فاندرفالس الخاص بالركيزة وتبين ان قيمتها تقدر ب $D_0 = 6.32\text{Å}$ في شروط دراستنا السابقة.
- بيّنت النتائج أن وجود الحصر السطحي ينعكس على الخواص الديناميكية للروتون، ولا سيما من خلال تعديل كتلته الفعالة، والتي تبين أنها تنخفض بنسبة تساوي 8.4718%.
- أظهرت الحسابات الترموديناميكية أن الروتونات السطحية تتميز بسلوك أقرب إلى غاز ثنائي الأبعاد ضعيف الكثافة ضمن شروط الدراسة عند درجة $T = 1K$، حيث تبقى المسافات البينية كبيرة مقارنةً بطولها الموجي، مما يدعم صلاحية التقريبات الإحصائية المستخدمة.
- تشير هذه النتائج مجتمعة إلى أن تأثير الركيزة لا يقتصر على إزاحة طاقية بسيطة، بل يمتد ليشمل تعديلًا متكاملاً في الخصائص الفيزيائية للروتون، سواء من الناحية الديناميكية أو الترموديناميكية.
- يعود انخفاض طاقة الفجوة إلى جهد فان دير فالس الجاذب الذي يرفع الكثافة والضغط الموضعيين للسائل قرب السطح، مما يسهل تشكّل الإثارات الروتونية بطاقة أقل. بينما انخفاض الكتلة الفعالة ناتج عن الحصر الهندسي ثنائي الأبعاد الذي يقيد حركة الدالة الموجية عمودياً، مما يقلل من القصور الذاتي الفعال للروتون ويمنحه مرونة واستجابة حركية أعلى (عطالة أقل) في المستوي الموازي للركيزة.

الاستنتاجات و التوصيات:

انطلاقا من النتائج التي تم التوصل إليها، يمكننا اقتراح عدد من المسارات البحثية التي من شأنها تعميق الفهم لهذا النظام. ونقترح ما يلي:

- توسيع الدراسة لتشمل تأثير خصائص الركيزة حيث سيؤدي ذلك إلى تعديل شدة الحصر والتأثيرات السطحية.
- إجراء مقارنات مع أنواع مختلفة من الركائز ذات خصائص مختلفة.
- يساهم تطوير النموذج من خلال إدخال تأثيرات إضافية مثل التغيرات الحرارية الدقيقة أو التفاعلات الضعيفة بين الروتونات في إعطاء وصف أكثر شمولاً للنظام.

References:

[1] S. Balibar, "The discovery of superfluidity," *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 146, no. 5, pp. 441-470, 2007.
[2] K. Matchev, J. Smolinsky, W. Xue, and Y. You, "Superfluid effective field theory for dark matter direct detection," *Journal of High Energy Physics*, vol. 2022, no. 5, p. 34, 2022.
[3] V. I. Tkachenko, "A convective model of a roton," *arXiv preprint*, arXiv:1708.03776, 2017.
[4] A. Nicolis and R. Penco, "Mutual interactions of phonons, rotons, and gravity," *Physical Review B*, vol. 97, no. 13, p. 134516, 2018.
[5] T. M. Sanders Jr, "Semiclassical mechanics of rotons," *Contemporary Physics*, vol. 42, no. 3, pp. 151-157, 2001.
[6] J. L. Tsai and J. F. Tu, "Characterizing mechanical properties of graphite using molecular dynamics simulation," *Materials & Design*, vol. 31, no. 1, pp. 194-199, 2010.
[7] V. I. Kruglov and H. Triki, "Quantum Dynamics and Elementary Excitations in Superfluid He4 Films at Low Temperatures," *arXiv preprint*, arXiv:2509.09137, 2025.
[8] G. Vidali, G. Ihm, H. Y. Kim, and M. W. Cole, "Potentials of physical adsorption," *Surface Science Reports*, vol. 12, no. 4, pp. 135-181, 1991.
[9] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics: Volume 6*. Oxford: Elsevier, 1987.
[10] R. J. Donnelly and C. F. Barenghi, "The observed properties of liquid helium at the saturated vapor pressure," *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 27, no. 6, pp. 1217-1274, 1998.
[11] V. D. Arp and R. D. McCarty, "Thermophysical Properties of Helium-4 from 0.8 to 1500 K with Pressures to 2000 MPa," NIST, Tech. Rep. NIST-TN/1334, 1989.
[12] A. C. Phillips, *Introduction to Quantum Mechanics*. Chichester, UK: John Wiley & Sons, 2013.
[13] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, J. B. Sykes, J. S. Bell, and M. E. Rose, *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory: Vol. 3 of Course of Theoretical Physics*. Oxford: Pergamon Press, 1958.
[14] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, 8th ed. San Diego, CA: Academic Press, 2014.
[15] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics: Volume 5*. Oxford: Elsevier, 2013.