

LOS POTENCIALES INTERATOMICOS ENTRE
ATOMOS DE HELIO

Vittorio Canuto*

Centro de Investigación del I.P.N.

Leopoldo García Colín S.**

Escuela Superior de Física y Matemáticas del I.P.N.

(Recibido: 7 Agosto 1963)

RESUMEN

A numerical comparison is studied amongst the three most widely used interatomic potentials between helium atoms, namely, the potentials of de Boer, Morse and Yntema-Schneider. One finds that all three agree quite well in the attractive region but that the latter one differs considerably from the first two in the repulsive region and moreover its physical significance in this region is not at all clear. The calculation suggests the use of Morse's potential in all practical applications

* Con licencia de la Universidad de Turin, Turin, Italia.

** Comisión Nacional de Energía Nuclear. Dirección actual: Centro de Investigación del I.P.N.

where $V(r)$ appears explicitly, this potential being a non-singular well behaved function.

Teoría

El propósito de este trabajo es el de establecer una comparación entre los diversos potenciales interatómicos para átomos de helio que han sido propuestos para cálculos donde la energía potencial aparece explícitamente. Tales potenciales han sido propuestos por de Boer¹, Morse² y Yntema-Schneider³.

Los valores numéricos para estos potenciales han sido calculados de sus expresiones analíticas:

$$V(r) = V_0 \left\{ \left(\frac{R}{r} \right)^{12} - \left(\frac{R}{r} \right)^6 \right\} \quad (\text{de Boer}) \quad (1)$$

Con $V_0 = 40.88^\circ \text{K}$ y $R = 2.55 \text{ \AA}$.

$$V(r) = \epsilon \left\{ e^{-4.18(r-r_0)} - 2e^{-2.09(r-r_0)} \right\} \quad (\text{Morse}) \quad (2)$$

con $\epsilon = 10.2^\circ \text{K}$ y $r_0 = 2.87 \text{ \AA}$.

$$V(r) = V_0 \left\{ 1200 e^{-ar} - \frac{1.24}{r^6} - \frac{1.89}{r^8} \right\} \quad (\text{Yntema-Schneider}) \quad (3)$$

con $V_0 = 7250^\circ \text{K}$ y $a = 4.82 \text{ \AA}^{-1}$.

Estos valores numéricos están dados en las tablas I, II y III respectivamente. Las gráficas de los potenciales de de Boer y Morse están dadas en las Figs. 1 y 2. Por otra parte, debido al intervalo de valores tan extenso para el potencial de Yntema-Schneider, hemos dividido la gráfica en dos partes.

La fig. 3 muestra la región repulsiva correspondiente al intervalo $0 \leq r$

$\leq 2.0 \text{ \AA}$ y la fig. 4 muestra la región esencialmente atractiva correspondiente al intervalo $2.4 \text{ \AA} \leq r \leq 5 \text{ \AA}$.

De los datos recopilados en estas tablas, se obtienen los siguientes resultados:

1.- En la región definida por el intervalo $2.4 \text{ \AA} \leq r \leq 5 \text{ \AA}$ donde los potenciales son esencialmente atractivos, los tres potenciales son casi iguales.

2.- Los potenciales de Morse y de de Boer tienen un mínimo a -10.2°K para un valor de $r = 2.87 \text{ \AA}$, en tanto que el potencial de Yntema-Schneider alcanza su mínimo para una r aproximadamente de 2.9 \AA y tiene un valor de -10.5°K .

3.- La parte repulsiva de los potenciales de Morse y de de Boer se comportan en forma similar, el segundo aumentando con una pendiente mayor que el primero. Esta parte corresponde al intervalo $0 \leq r \leq 2 \text{ \AA}$.

4.- Por otra parte, para el mismo intervalo ($0 \leq r \leq 2 \text{ \AA}$) el comportamiento del potencial de Yntema-Schneider es totalmente diferente. Tiene un valor de $-\infty$ para $r = 0$, alcanza un máximo de $7.3 \times 10^4 \text{ }^\circ \text{K}$ para una $r \approx 0.84 \text{ \AA}$ y después decrece hacia la región atractiva.

Discusión de los Resultados

En la extensa literatura que existe sobre el He^3 líquido^{1,2*} hemos encontrado resultados afirmando que los potenciales de de Boer y de Yntema-Schneider son "casi iguales" excepto en la vecindad del origen. En nuestra opinión esta afirmación debe considerarse más cuidadosamente en el sentido siguiente:

La frase "casi iguales" debe aplicarse exclusivamente a la región donde los potenciales son esencialmente atractivos ($2.4 \text{ \AA} \leq r \leq 5 \text{ \AA}$) y esto se cumple también si se establece una comparación entre los potenciales de Morse y de Yntema-Schneider. Por otra parte, en la vecindad del origen los potenciales de Morse y de de Boer no tienen nada en común con el potencial de Yntema-Schneider. Por esto queremos decir, que no solo existe una discrepancia en los valores numéricos, sino también que para valores de r menores que 0.7 \AA , aproximadamente, el potencial de Yntema-Schneider tiene signo diferente, esto es, se convierte en atractivo y fí-

* Para mayor número de referencias, consultar estos artículos.

sicamente ésto no tiene sentido. Esta discrepancia en el comportamiento de dichos potenciales cerca del origen explica el porqué se encontró que las propiedades termodinámicas del He^3 líquido calculadas por Brueckner y Gammel son muy sensibles con respecto al comportamiento de $V(r)$ en la vecindad del origen^{1,2,4}

Se podría pensar que tomando $V_0 = -7250^\circ\text{K}$ en el potencial de Yntema-Schneider la curva así obtenida resultaría ser correcta. Este, sin embargo no es el caso pues entonces la parte atractiva aparecería en la región definida por $0 \leq r \leq 2.0 \text{ \AA}$ con un mínimo de $-7.3 \times 10^4 \text{ }^\circ\text{K}$ para una $r \simeq 0.84 \text{ \AA}$ mas una nueva parte repulsiva en la región donde anteriormente aparecía la parte atractiva. Esto es físicamente incorrecto puesto que el valor mínimo de la parte atractiva corresponde a un valor de r menor que el diámetro del átomo de helio. La nueva parte repulsiva también carece de sentido.

En conclusión, esta discusión muestra que no existe ninguna razón por la cual el potencial de Morse no pueda utilizarse en todo cálculo práctico en problemas relativos al cálculo de las propiedades termodinámicas del He^3 y del He^4 , ya que es una función continua en todo el intervalo que usualmente se requiere para dichos cálculos⁵.

Los autores desean expresar su agradecimiento al Ing. Manuel Barberena, Director del Centro Nacional de Cálculo del I.P.N. por facilitar el uso de la máquina IBM-1620 para efectuar los cálculos numéricos, al Ing. M.A. García por llevar a cabo los cálculos y al Sr. Josué Molina Castillo por el trazo de las figuras.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- de Boer, J., Progress in Low Temperature Physics, Ed. by C.J. Gorter, North Holland Publishing Co., Amsterdam, 1957 Vol. II.
- 2.- Bernardes, N. Rev. Mod. Phys. **34**, 190, (1962).
and Brewer, D.F.
- 3.- Yntema, J.L. and J. Chem. Phys. **18**, 611, (1950).
Schneider, W.G.
- 4.- Brueckner, K.A. Phys. Rev. **109**, 1040, (1958).
and Gammel, J.L.
- 5.- Ichimura, H. Proa. Theor. Phys. **2**, 374 (1954).

TABLA I
 POTENCIAL DE DE BOER

r (en Å)	$V(r)$ (en °K)
.50	+ 12656923000
.60	+ 1419397400.
.70	+ 223167010.
.80	+ 44926127.
.90	+ 10920498.
1.00	+ 3079005.
1.10	+ 978303.
1.20	+ 342827.
1.30	+ 130310.
1.40	+ 53014.782
1.50	+ 22830.853
1.60	+ 10308.826
1.70	+ 4838.381
1.80	+ 2340.841
1.90	+ 1157.298
2.00	+ 578.835
2.10	+ 289.058
2.20	+ 141.260
2.30 -	+ 65.087
2.40	+ 25.802
2.50	+ 5.808
2.60	- 4.001
2.70	- 8.422
2.80	- 10.016
2.90	- 10.161
3.00	- 9.6030288

	$V(r)$
3.25	- 7.3125580
3.50	- 5.1997725
3.75	- 3.6421097
4.00	- 2.5598571
4.25	- 1.8183105
4.50	- 1.3087411
4.75	- .9551419
5.00	- .7066786

TABLA II
POTENCIAL DE MORSE

r (en Å)	$V(r)$ (en °K)
.50	+ 201745.82
.60	+ 132379.66
.70	+ 86794.99
.80	+ 56851.430
.90	+ 37192.625
1.00	+ 24294.563
1.10	+ 15839.111
1.20	+ 10301.691
1.30	+ 6679.8612
1.40	+ 4314.6947
1.50	+ 2773.2265
1.60	+ 1771.0951
1.70	+ 1121.6447
1.80	+ 702.4409
1.90	+ 433.2441
2.00	+ 261.5255
2.10	+ 152.9435
2.20	+ 85.085054
2.30	+ 43.353203
2.40	+ 18.266912
2.50	+ 3.689001
2.60	- 4.336100
2.70	- 8.343653
2.80	- 9.946836
2.90	- 10.162326
3.00	- 9.622634

r	$V(r)$
3.25	- 7.136259
3.50	- 4.734870
3.75	- 2.984783
4.00	- 1.832275
4.25	- 1.108478
4.50	- .665059
4.75	- .397109
5.00	- .236451

TABLA III
 POTENCIAL DE YNTEMA - SCHNEIDER

r (en Å)	$V(r)$ (en °K)
.50	- 3.264687 x 10 ⁶
.60	- 5.1731846 x 10 ⁵
.70	- 1.35955 x 10 ⁴
.80	+ 6.8923111 x 10 ⁴
.90	+ 6.5233738 x 10 ⁴
1.00	+ 4.7633548 x 10 ⁴
1.10	+ 3.1940812 x 10 ⁴
1.20	+ 2.060078 x 10 ⁴
1.30	+ 1.300385 x 10 ⁴
1.40	+ 8.0944227 x 10 ³
1.50	+ 4.9850939 x 10 ³
1.60	+ 3.0410984 x 10 ³
1.70	+ 1.8370663 x 10 ³
1.80	+ 1.0971571 x 10 ³
1.90	+ 645.83181
2.00	+ 372.70791
2.10	+ 208.95069
2.20	+ 111.90724
2.30	+ 55.289943
2.40	+ 22.978805
2.50	+ 5.1395518
2.60	- 4.1931895
2.70	- 8.6135981
2.80	- 10.269068
2.90	- 10.428677
3.00	- 9.8314437
3.25	- 7.349408

	$V(r)$
3.50	- 5.0823560
3.75	- 3.4565034
4.00	- 2.364855
4.25	- 1.6418784
4.50	- 1.1599593
4.75	- 0.83402869
5.00	- 0.60977002

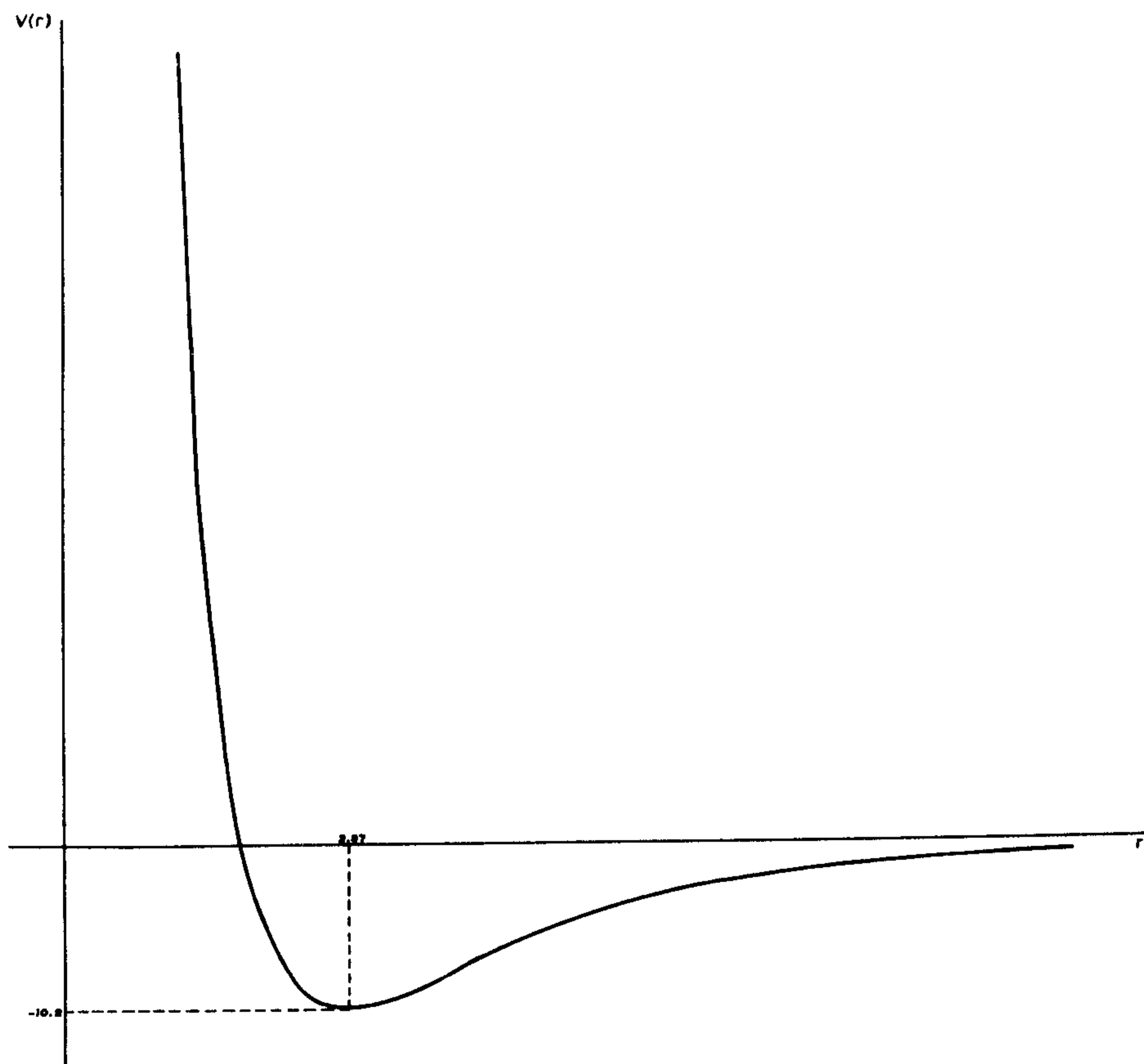


Fig. 1.- Curva del potencial de de Boer para valores de $r > 2.0 \text{ \AA}$. $V(r)$ está expresado en $^{\circ}\text{K}$ y r en \AA .

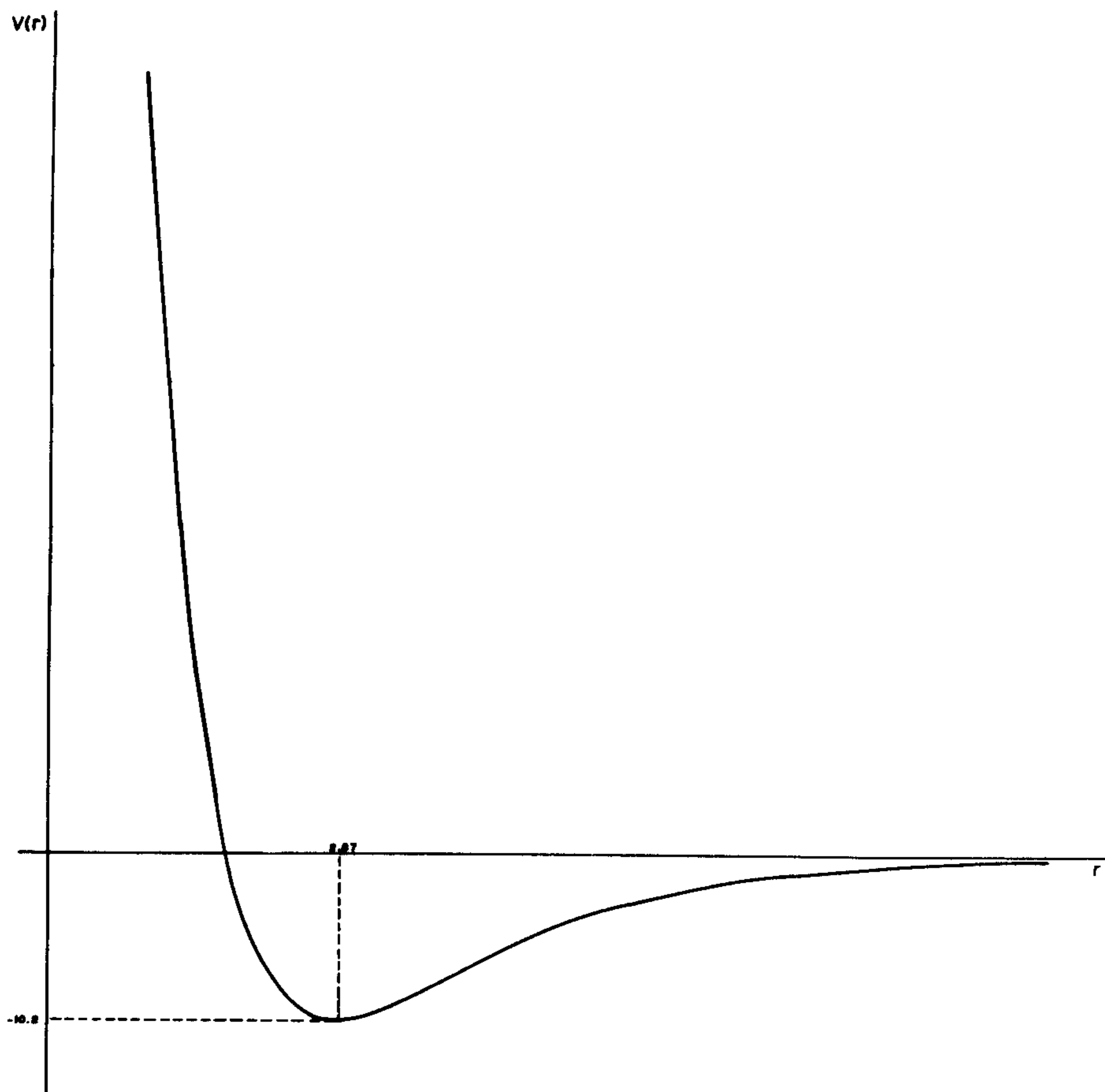


Fig. 2.- Curva del potencial de Morse para valores de $r > 2.0 \text{ \AA}$. $V(r)$ está expresado en $^{\circ}\text{K}$ y r en \AA .

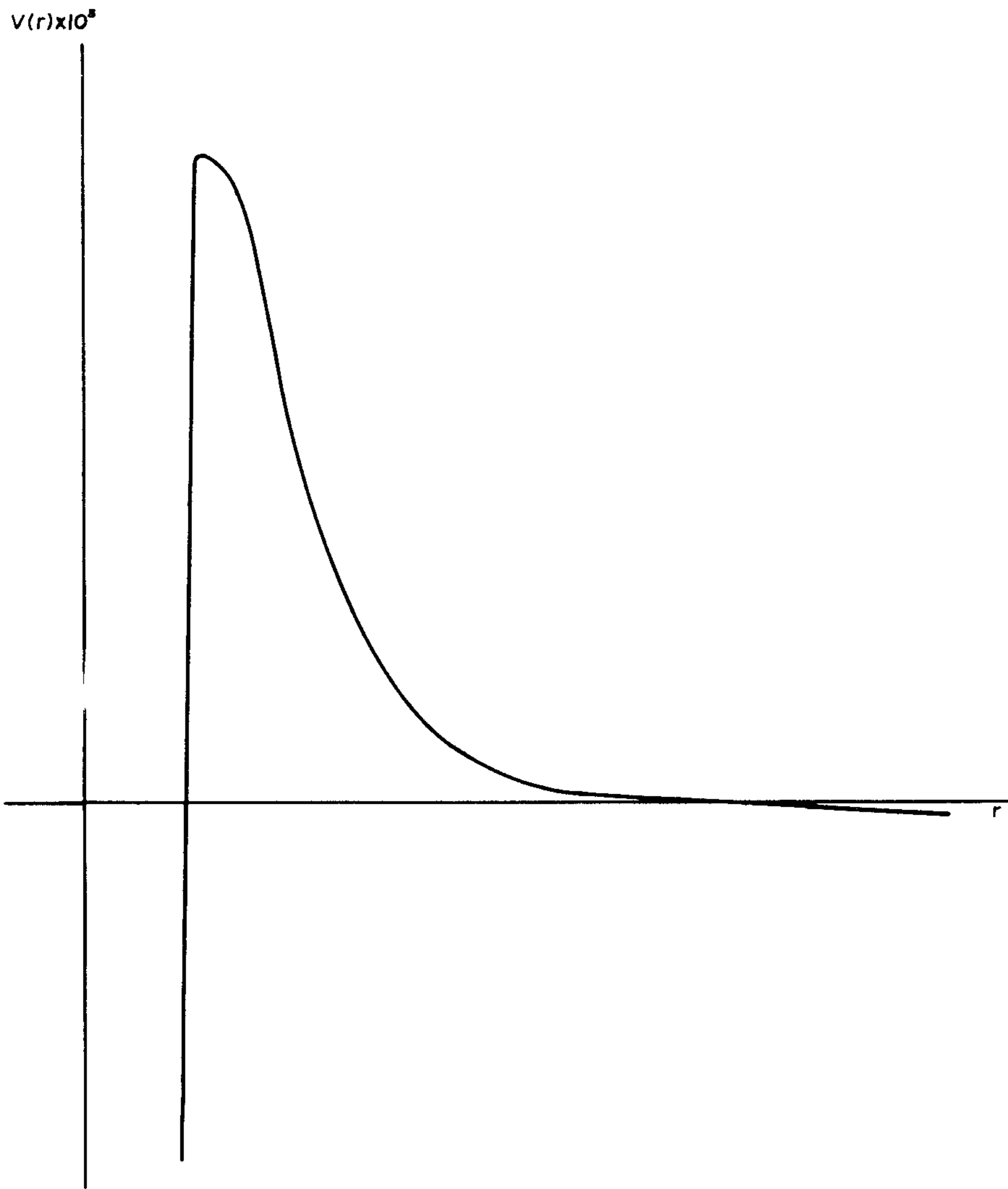


Fig. 3.- Curva del potencial de Yntema-Schneider para la región definida por $0 \leq r \leq 2 \text{ \AA}$. $V(r)$ está expresado en $^{\circ}\text{K} \times 10^{-4}$ y r en \AA .

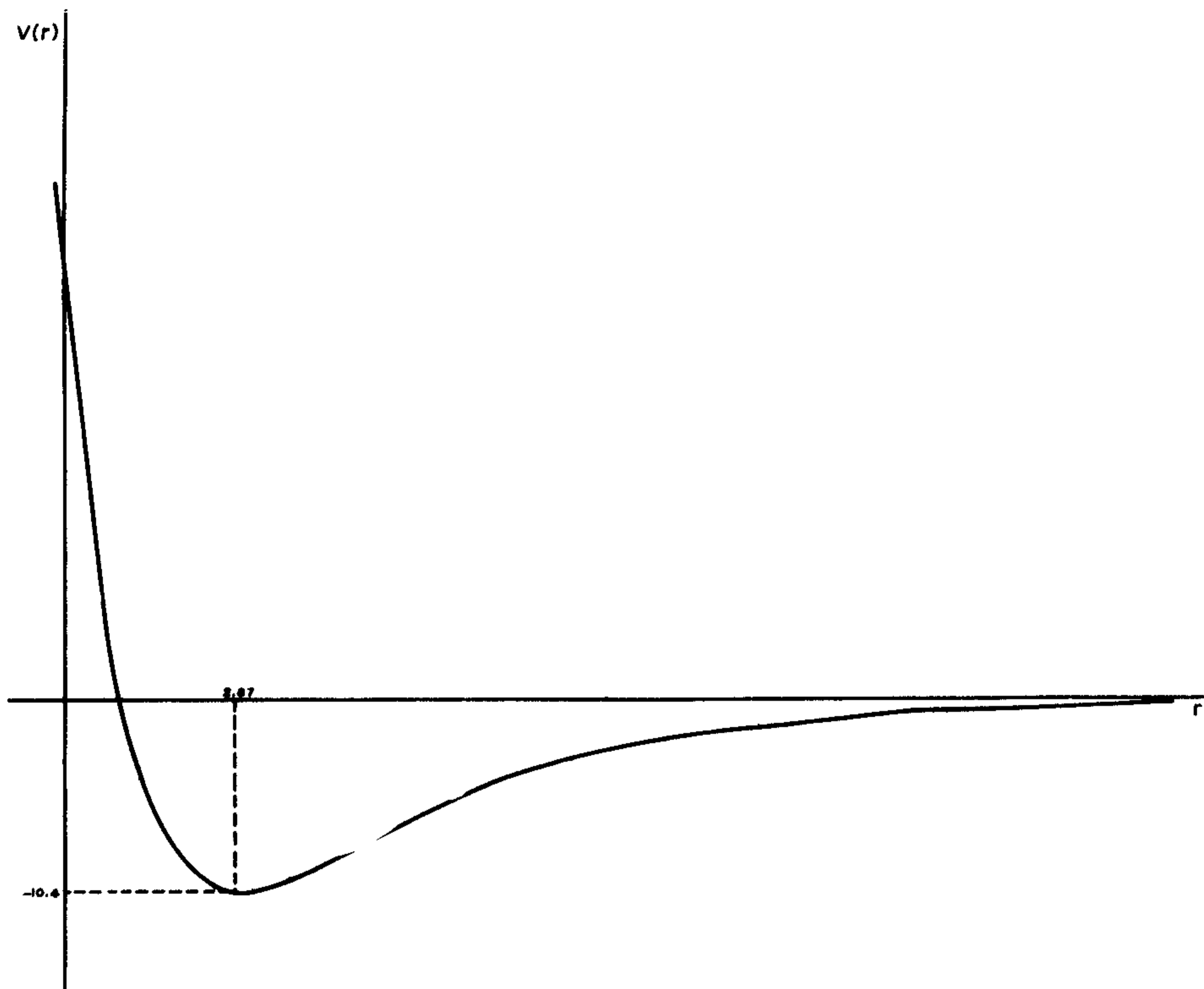


Fig. 4.- Curva del potencial de Yntema-Schneider para la región atractiva,
 $r > 2.0 \text{ \AA}$. $V(r)$ está expresado en $^{\circ}\text{K}$ y r en \AA .

Esta página está intencionalmente en blanco