

УДК 532.536

Альо́хін О.Д.¹, д.ф.-м. н., проф.
Білоус О.І.², к.ф.-м. н., доц.

Аналіз величин критичних показників визначених різними теоретичними та емпіричними методами

В роботі проведено порівняльний аналіз величин критичних показників ФТФП визначених на основі різних методів: ε -розкладів, малого параметру, емпіричного π -методу, та порівняння їх величин з існуючими експериментальними даними.

Показано, що величини малих критичних показників, $\alpha_t > \eta > \alpha_\mu \ll \beta$, одержаних методом ε -розкладів, не задовольняють відомим співвідношенням ФТФП. В той же час величини цих критичних показників, одержані феноменологічними методами, повністю узгоджуються з фундаментальними співвідношеннями ФТФП та існуючими експериментальними даними.

Ключові слова: флуктуаційна теорія, критичні показники, метод ε -розкладів, метод малого параметру, π -метод

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, веб сайт: <http://criticalfluid.com.ua/>
e-mail: alekhin@univ.kiev.ua,

² Національний авіаційний університет, 02058, м.Київ, пр-т Комарова, 1,
e-mail: ²o_bilous@ua.fm

Alekhin A.D.¹, Sci.Dr., Prof.
Bilous O.I.², Ph.D.

Analysis of sizes of critical indexes of certain by different theoretical and empiric methods

In this paper, a comparative analysis of the critical parameters FTFP defined on the basis of different methods: ε -scheduling, phenomenological method of small parameter π -empirical method, and compare their values with existing experimental data.

It is shown that small quantities of critical parameters $\alpha_t > \eta > \alpha_\mu \ll \beta$, obtained by ε -scheduling, do not satisfy the well-known relation FTFP. At the same time the value of the critical exponents obtained by phenomenological methods are fully consistent with all known correlations FTFP and existing experimental data.

Key Words: fluctuation theory, critical parameters, the method ε -scheduling, the method of small parameter, π -method

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
веб сайт: <http://criticalfluid.com.ua/>
e-mail: alekhin@univ.kiev.ua,

² National Aviation University, 1 Kosmonavta Komarova Avenue, k.1, Kyiv, 02058 Ukraine
e-mail: ²o_bilous@ua.fm

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

На даний час у зв'язку з широким застосуванням унікальних властивостей критичного флюїду (КФ) в новітніх технологіях [1-3] значно зріс інтерес до розробки рівняння стану речовини в критичному стані. Це зумовило потребу в більш точному визначенні величин критичних показників (КП) флуктуаційної теорії фазових переходів (ФТФП) [4-6], які є одними з основних параметрів даного рівняння стану.

Слід відмітити, що розрахунки величин критичних показників, які проводяться

різноманітними теоретичними методами: методами ε -розкладів ($\varepsilon=4-d$), розв'язку рівнянь ренормалізаційної групи та інших [4-6], приводять до результатів, які дещо відрізняються між собою (d -розмірність простору). На жаль, в цих розрахунках не визначені конкретні об'єктивні похибки величин цих критичних показників. Тому не можна віддати перевагу тому чи іншому теоретичному результату. Величини КП, отримані методом ε -розкладів, при

різних ступенях розкладу по ε^n , представлені в таблиці 1.

Таблиця 1.

Величини критичних показників одержані методом ε -розкладів, малого параметру та π -методу

Критичні показники ФТФП	Метод ε -розкладу			Метод МП	π -метод	Експерим. дані
	ε^1	ε^2	ε^3			
ν	0,583	0,626	0,61	0,636	0,637	0,60-0,63
ξ	0,417	0,402	0,405	0,405	0,405	0,40-0,41
δ	4	4,463	4,648	4,640	4,630	4,2-4,8
γ	1,167	1,244	1,195	1,233	1,232	1,2-1,3
β	0,33	0,336	0,301	0,338	0,339	0,32-0,35
α_t	0,167	0,077	0,121	0,091	0,090	0,09-0,11
η	0	0,019	0,036	0,063	0,065	0,03-0,06
$\alpha_\mu=2\xi/\nu-3\xi$	0,180	0,078	0,113	0,058	0,057	—

Критичні показники, визначені експериментально різними дослідниками також дещо відрізняються між собою [7-10] і від розрахунків теорії [4-6].

Згідно ФТФП [4-6] для тривимірних ($d=3$) систем величини восьми критичних показників пов'язані між собою за допомогою шести рівнянь

$$\delta=1/(3\xi-1), \gamma=2\nu/\xi-3\nu, \beta=3\nu-\nu/\xi, \alpha_t=2-3\nu, \alpha_\mu=2\xi/\nu-3\xi, \eta=5-2/\xi \quad (1)$$

Виходячи з (1) величини критичних показників ФТФП [4-6]: δ , γ , β , α_t , α_μ , η визначаються лише двома критичними показниками температурної та польової залежності радіуса кореляції: ν та ξ ($R_c \sim t^{-\nu}$, $R_c \sim \Delta\mu^{-\xi}$).

З (1) слідує, що величини всіх восьми критичних показників можуть бути визначені, якщо до представлених 6 рівнянь (1) знайти ще два нових рівняння, які пов'язують між собою критичні показники радіуса кореляції ν та ξ . В рамках цього напрямку досліджень в роботах [11, 12] запропоновано новий підхід визначення величин критичних показників. Даний метод полягає в введенні у відомі співвідношення ФТФП (1) малих параметрів (МП), які можуть бути представлені у вигляді:

$$\delta_0 = 5 - \delta \ll \delta, \gamma_0 = 4/3 - \gamma \ll \gamma, \nu_0 = 2/3 - \nu \ll \nu, |\beta_0| = |\beta - 1/3| \ll \beta, \xi_0 = \xi - 2/5 \ll \xi \quad (2)$$

Після підстановки МП (2) в (1) були одержані два нових співвідношення між критичними показниками радіуса кореляції ν та ξ [11, 12].

$$\xi - \beta = \xi - 3\nu + \nu/\xi = 1/15 \pm 10^{-3} \quad (3)$$

$$\xi = \nu^2(1 \pm 10^{-3}) \quad (4)$$

Спільне рішення рівнянь (3) та (4) дозволяє знайти величини критичних показників радіуса кореляції: $\nu=0,636$, $\xi=0,405$ і відповідно малих параметрів (2) $\nu_0=0,03$, $\xi_0=0,005$. Тоді, використовуючи систему рівнянь між критичними показниками (1), було знайдено величини всіх восьми критичних показників ФТФП. Їх значення представлені в таблиці 1.

Надалі, в даній роботі, було проведено порівняння величин відносно малих КП $\alpha_t > \eta > \alpha_\mu \ll \beta$, одержаних методами ε -розкладів [4-6], та МП [11, 12] і проведено їх аналіз. Необхідно відмітити, що в науковій літературі [4-6] відсутня інформація про величину критичного показника польової залежності теплоємності α_μ ($C_v \sim \Delta\mu^{-\alpha_\mu}$). Тому в табл. 1 представлено його значення розраховане за співвідношенням ФТФП (1) $\alpha_\mu = 2\xi/\nu - 3\xi$. Як видно з табл.1 одержане значення α_μ близьке за величиною до критичного показника теплоємності α_t ($C_v \sim t^{-\alpha_t}$), одержаного методом ε -розкладів ($\alpha_\mu \approx \alpha_t$). Цей результат, з нашої точки зору, є сумнівним тому, що він суперечить фундаментальному співвідношенню ФТФП [4-6] $\alpha_t/\alpha_\mu = \nu/\xi$. Проведені нами розрахунки показують, що $\nu/\xi = 1,56 \neq \alpha_t/\alpha_\mu \approx 1$. Цей результат свідчить про великі похибки їх розрахунків.

Перейдемо тепер до аналізу відомих фундаментальних співвідношень ФТФП [4-6]:

$$2\beta + \gamma + \alpha_t = \beta + \beta\delta + \alpha_t = \beta + \frac{\nu}{\xi} + \alpha_t = 2 \quad (5)$$

$$\beta(\delta-1)/\gamma = 1 \quad (6)$$

$$\left(\alpha_t/\alpha_\mu = v/\xi = \beta\delta\right) \quad (7)$$

Результати проведених розрахунків показані в табл.2

З табл. 2 випливає, що результати розрахунків за співвідношеннями (5), (6) одержані при різних

наближеннях ε -розкладів по параметрам $\varepsilon^n=(4-d)^n$ ($n=1, 2, 3$), відрізняються між собою, а рівність (7) зовсім не виконується. Тобто значення критичних показників, одержаних методом ε -розкладу, не узгоджуються з співвідношенням (7).

Таблиця 2.

Перевірка рівнянь ФТФП за даними величин критичних показників, одержаних різними методами

Рівняння ФТФП	Метод ε -розкладу			Метод МП	π -метод
	ε^1	ε^2	ε^3		
$2\beta + \gamma + \alpha_t = 2$	1,994	1,993	1,918	2,000	2,000
$\beta + \beta\delta + \alpha_t = 2$	1,817	1,913	1,821	1,997	1,999
$\beta + \frac{v}{\xi} + \alpha_t = 2$	1,895	1,970	1,928	1,999	2,002
$\beta(\delta-1)/\gamma = 1$	0,848	0,935	0,919	0,999	0,999
α_t/α_μ	0,926	0,987	1,071	1,569	1,579
v/ξ	1,398	1,557	1,506	1,570	1,573
$\beta\delta$	1,32	1,450	1,399	1,568	1,570

Перейдемо тепер до аналізу величин критичних показників розрахованих методом введення малих параметрів [11, 12] в співвідношення ФТФП (1). Одержані результати також представлені в табл.1, 2. Порівняння їх значень (табл.1) з розрахунками за формулами (1), (3), (4) показує їх повну тотожність. Це підтверджують також результати розрахунків відомих фундаментальних співвідношень ФТФП (5)-(7), представлені в таблиці 2. Виходячи з цього можна стверджувати, що всі критичні показники, одержані методом малих параметрів [11, 12] повністю задовольняють рівняння (1), (3)-(7), а їх величини близькі до істинних значень критичних показників ФТФП [4-6].

Розглянемо тепер ще один метод визначення величин критичних показників. Виходячи з точки зору засновників ФТФП [4-6], величини критичних показників повинні бути пов'язані з фундаментальними константами. Спробуємо проаналізувати цю точку зору.

Згідно рівнянь ФТФП (1) для систем класу універсальності 3-вимірної моделі Ізінга [4-6] величина критичного показника радіусу кореляції ν ($R_c \sim t^{-\nu}$) повинна задовольняти нерівності $\nu < 2/3$. Тобто, цей показник дорівнює відношенню $\nu = 2/x$, де величина $x > 3$.

Використовуючи значення критичного показника ν , одержаного методом введення малого параметру ν_0 , [11-12], маємо, що $\nu = 2/3 - \nu_0 = 0,63666 = 2/x$, ($\nu_0 = 0,03$). Звідки знаходимо величину невідомого параметра $x = 3,1415$. Як бачимо цей невідомий параметр x за своєю величиною виявляється дуже близьким до величини фундаментальної константи $\pi = 3,14159$.

Використовуючи тепер зв'язок показників ν та ξ (4) $\xi = \nu^2$ виразимо їх через число π :

$$\nu = \frac{2}{\pi}, \quad \xi = \nu^2 = \frac{4}{\pi^2} \quad (8)$$

Після цього на основі співвідношень ФТФП (1) знайдемо зв'язок всіх інших показників ФТФП з числом π :

$$\delta = \frac{\pi^2}{(12 - \pi^2)}, \quad \gamma = \pi - 6/\pi, \quad \beta = \frac{6}{\pi} - \frac{\pi}{2}, \quad (9)$$

$$\alpha_t = 2 - \frac{6}{\pi}, \quad \alpha_\mu = \frac{4}{\pi} \left(1 - \frac{3}{\pi}\right) \quad \eta = 5 - \frac{\pi^2}{2}$$

Одержані за допомогою числа π значення всіх критичних показників (8), (9) представлені в табл. 1, 2. Як видно величини цих критичних показників майже збігаються з їх значеннями одержаними методом малого параметру [11, 12] і

підтверджується за своєю величиною з більшістю існуючих експериментальних даних [7-10].

На основі проведених досліджень зроблено ряд висновків:

1. Співставлення величин критичних показників, одержаних методом ε -розкладу [4-6] з розрахунками на основі рівнянь ФТФП (1) свідчить про значну розбіжність в їх величинах. Для відносно великих критичних показників $\delta \gg \gamma > \nu > \xi > \beta$ ця розбіжність становить величину (5-10) %; для відносно малих $\alpha_t > \eta > \alpha_\mu \ll \beta$ розбіжність досягає величин (50-100) %.

2. Проведений аналіз показує, що величини малих критичних показників, $\alpha_t > \eta > \alpha_\mu \ll \beta$, одержані методом ε -розкладів, внаслідок великих похибок їх розрахунків приводить до того, що фундаментальні рівності (7) ФТФП не виконуються (табл.2).

3. Застосування метода малого параметра [11, 12] приводить до більш точного визначення величин критичних показників. Це підтверджується точністю виконання фундаментальних рівнянь (1), (5)-(7) (табл.2). Тобто такі значення критичних показників є найбільш наближеними до істинних значень критичних показників ФТФП [4-6]. Одержані значення критичних показників підтверджуються більшою частиною експериментальних даних [7-10].

Список використаних джерел

1. Supercritical fluids: Theory and practice. – Moscow, 2008, V.3, № 2. P.1 -101. (in Russian).
2. *Vostrikov A.A., Fadeeva O.N., Fadeeva I.I., Socol M.Ya.* Formation of nanoparticles Al_2O_3 at aluminum oxidation by water at sub- and supercritical parameters// Supercritical fluids: Theory and practice. – 2010, V.5, № 1. P. 12-25. (in Russian).
3. *Alekhin A.D.* Supercritical fluid in the field of gravitation of Earth // Monitoring. Science and technologies. – 2011. – 1(6). – P. 69-78. (in Russian).
4. *Patashinskiy A.Z., Pokrovskiy V.A.* Fluctuation theory of phase transitions. – Moscow, Science. – 1982. (in Russian).
5. *Stenli G.* Phase transitions and critical phenomena. M. – 1973. – 419 p. (in Russian).
6. *Ma Sh.* Modern theory of the critical phenomena. – M., 1980. – 298 p. (in Russian).
7. *Anisimov M.A.* The critical phenomena in liquids and liquid crystals. – M. – 1987 – 280 p. (in Russian).
8. *Anisimov M.A., Rabinovich V.A., Сычев B.B.* Thermodynamics of critical condition of individual substances. – M. – 1990. – 190 p. (in Russian).
9. *Ivanov D.Ya.* Critical behavior of the unidealized systems. M. – 2003. – 248 p. (in Russian).
10. *Alekhin A.D., Dorosh A.K., Rydnikov E.G.* Critical condition of substance in the field of gravitation of Earth. Kyiv. – 2008. – 404 p. (in Ukrainian).
11. *Alekhin A.D.* Calculations of critical indexes of the three-dimensional systems by the method of small parameter// YFJ – 2006. – V. 51, № 9. – P. 869-871. (in Ukrainian).
12. *Alekhin A.D.* Critical indices for systems of different space dimensionality // Journal of Molecular Liquids – 2005. – 120/1-3 – P. 43-45.

4. В роботі проаналізована точка зору засновників ФТФП [4-6], про зв'язок величин критичних показників із фундаментальними константами. Для цього використана відома нерівність ФТФП $\nu < \frac{2}{3}$ (2), яка слідує з рівнянь (1). Далі, на основі одержаного в роботі значення критичного показника $\nu = 0,6366 = \frac{2}{x} < \frac{2}{3}$ знайдено величину невідомого параметра $x = 3,1415$. Величина цього параметра виявилась дуже близькою до величини фундаментальної константи $\pi = 3,14159$. Це дозволяє відобразити основні критичні показники ФТФП ν і ξ [4-6] через число π : $\nu = \frac{2}{\pi}$, $\xi = \nu^2 = \frac{4}{\pi^2}$. Звідси, на основі рівнянь ФТФП (1), можна виразити через фундаментальну константу π всі інші критичні показники ФТФП (9).

Таким чином, одержані емпіричним π -методом величини критичних показників ФТФП [4-6] майже збігаються з результатами їх розрахунків феноменологічним методом малого параметра [11, 12] і підтверджуються даними більшості експериментальних досліджень [7-10].

Надійшла до редколегії 16.01.13