

РОЗПОДІЛ РІДИНИ В ЦИЛІНДРИЧНІЙ КЮВЕТІ В ОКОЛІ КРИТИЧНОГО СТАНУ

О. М. Васильєв^{1,2}, П. І. Гордійчук¹

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет,
кафедра теоретичної фізики, вул. Володимирська, 64, Київ, МСП 01601

²Національний технічний університет України "КПІ", медико-інженерний факультет,
кафедра біомедичної інженерії, вул. Янгеля, 16/2, Київ, 03056

(Отримано 2 вересня 2009 р.)

У статті розв'язано задачу з розрахунку профілю густини в циліндричній кюветі за умови дії пристінкового потенціалу та гравітаційного поля. Досліджено особливості поведінки такої системи в близькому околі критичного стану. Показано, що навіть незначний короткодіючий потенціал при наближенні системи до критичного стану може приводити до суттєво неоднорідного розподілу рідини в кюветі.

Ключові слова: рідка система, густина, просторове обмеження, зовнішнє поле, пристінковий потенціал.

PACS number(s): 05.70.Fh, 05.70.Jk

ВСТУП

Незважаючи на значні успіхи статистичної теорії складних систем (див., наприклад, [1–3]), у тому числі й рідких, низка важливих проблем і досі не розв'язана. Серед них задача з розрахунку профілів рівноважного розподілу густини в просторово обмежених рідких системах під дією зовнішнього поля. Раніше в серії робіт було запропоновано підхід щодо розв'язання такої задачі для ряду конкретних випадків. У них розрахунок профілю густини виконано в межах наближення плавної неоднорідності (див., наприклад, [4–8]). Метод базується на тому, що вираз для функціонала вільної енергії розкладається в ряд за відхиленням густини від рівномірного розподілу та її градієнта до другого порядку включно. Важливою при цьому є умова незмінності загальної маси речовини в кюветі.

На відміну від раніше розв'язаних задач, у цій статті розглянуто систему, обмежену в усіх напрямках. Задачу розв'язано в найзагальнішому випадку для поля, що має радіальну симетрію й залежить як від відстані до осі циліндра кювети, так і відстані до плоских основ кювети. На основі отриманого загального розв'язку проаналізовано часткові випадки.

Щодо практичного застосування результатів роботи, то вони можуть бути корисними при обробці експериментів з рефракції нейтронів рідкими системами (див., наприклад, [9–12]). Порівняно з уже наявними теоретичними результатами, запропонована система адекватніша до реально досліджуваних зразків. Крім того, результати роботи можуть бути корисними при порівнянні даних числового моделювання методами Монте-Карло щодо розподілу густини в рідких, просторово обмежених системах із локальним типом міжчастинкової взаємодії й локальними типами пристінкових потенціалів [13, 14]. Однак слід відразу зазначити, що наш підхід принципово не дає змоги врахувати скінченність розмірів частинок рідини, тому одержані

тут профілі розподілу густини не містять осциляцій, характерних для результатів, отримуваних числовим моделюванням.

І. ВИХІДНА МОДЕЛЬ

Розглядаємо просторово обмежену рідину з геометрією скінченного циліндра. Радіус основи циліндричної кювети дорівнює R , а його висота становить h . Полярні координати r та z змінюються в межах $0 \leq r \leq R$ та $0 \leq z \leq h$ (оскільки поле, згідно з припущенням, має радіальну симетрію, залежність від полярного кута не розглядаємо). Як уже зазначалося, порівняно з роботою [8], у цьому випадку циліндр обмежений.

У межах наближення плавної неоднорідності припускаємо, що наявність поля $U(r, z)$ призводить до відхилення розподілу густини від рівномірного розподілу. Позначмо таке відхилення через $\delta\rho(r, z)$. Додав-ку до вільної енергії, зумовлену неоднорідністю розподілу, позначмо через $\delta\Phi$. Тоді можемо записати так:

$$\delta\Phi = \frac{1}{2} \int \left(a(\delta\rho)^2 + b(\nabla\delta\rho)^2 + 2U(r, z)\delta\rho \right) dV. \quad (1)$$

У цьому виразі інтегрування виконуємо за об'ємом усієї системи, а параметри a та b є феноменологічними параметрами моделі. Задача зводиться до мінімізації функціонала (1) за додаткової умови

$$\int \delta\rho dV = 0, \quad (2)$$

яка є наслідком незмінності маси рідини всередині зразка.

Загальний розв'язок задачі можна записати у вигляді (δ_{ij} — символ Кронекера)

$$\delta\rho(r, z) = -\frac{1}{b} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1 - \delta_{m0}\delta_{n0})U_{nm}}{\kappa^2 + \left(\frac{\pi m}{h}\right)^2 + \left(\frac{\mu_n}{R}\right)^2} \times J_0\left(\frac{\mu_n r}{R}\right) \cos\left(\frac{\pi m z}{h}\right), \quad (3)$$

де позначено $\kappa^2 = a/b$, $J_0(\cdot)$ є функцією Беселя нульового індексу, власні числа μ_n є нулями функції Беселя першого індексу (тобто $J_1(\mu_n) = 0$, причому вважається, що $\mu_0 = 0$), а коефіцієнти розкладу U_{nm} визначаються співвідношенням

$$U_{nm} = \frac{2 - \delta_{m0}}{\pi h R^2 J_0^2(\mu_n)} \times \int U(r, z) J_0\left(\frac{\mu_n r}{R}\right) \cos\left(\frac{\pi m z}{h}\right) dV. \quad (4)$$

У частковому випадку, коли зовнішній потенціал $U(r, z)$ є суперпозицією потенціалів $V(r)$ та $W(z)$, тобто $U(r, z) = V(r) + W(z)$, загальний розв'язок дещо спрощується і має вигляд:

$$\delta\rho(r, z) = -\frac{1}{b} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{V_n}{\kappa^2 + \left(\frac{\mu_n}{R}\right)^2} J_0\left(\frac{\mu_n r}{R}\right) - \frac{1}{b} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{W_m}{\kappa^2 + \left(\frac{\pi m}{h}\right)^2} \cos\left(\frac{\pi m z}{h}\right), \quad (5)$$

де коефіцієнти розкладу

$$V_n = \frac{2}{R^2 J_0^2(\mu_n)} \int_0^R V(r) J_0\left(\frac{\mu_n r}{R}\right) r dr \quad (6)$$

та

$$W_m = \frac{2}{h} \int_0^h W(z) \cos\left(\frac{\pi m z}{h}\right) dz \quad (7)$$

відповідно.

Тут нас цікавитиме вплив пристінкового потенціалу та гравітаційного поля на розподіл рідини в системі за умови, що вона перебуває в близькому околі критичного стану. Для аналізу такої критичної поведінки розглянемо конкретний вигляд пристінкового потенціалу. Зокрема вважатимемо, що пристінковий потенціал діє тільки на відстані d від стінки і є сталим зі значенням U_0 . Зрозуміло, що такий модельний потенціал є суттєвим наближенням, однак для можливості його використання існує декілька причин.

По-перше, визначення точного вигляду потенціалів прямої взаємодії — задача надзвичайно складна, тому обмежуються, як правило, модельними потенціалами [15]. По-друге, як показують результати числового моделювання, теоретичні розрахунки та експериментальні дослідження, для потенціалів локального типу взаємодії поведінка рідких систем слабо залежить від конкретного типу потенціалу взаємодії [16–18]. По-третє, такий тип потенціалу дає змогу отримати точний аналітичний результат, що суттєво спрощує подальший аналіз.

Таким чином, розглядаємо потенціал $U(r, z)$ у вигляді:

$$U(r, z) = U_0(\theta(r + d - R) + \theta(d - z) + \theta(r + d - h)) + gz, \quad (8)$$

де через U_0 позначено величину пристінкового потенціалу, g є прискоренням вільного падіння, а $\theta(x)$ — функція Хевісайда. Коефіцієнти розкладу (6) та (7), що входять у вираз (5), для функції розподілу густини в такому випадку визначаємо співвідношенням:

$$V_n = -\frac{2U_0 J_1(\mu_n(1 - d/R))}{\mu_n R J_0(\mu_n)^2} \quad (9)$$

та

$$W_m = \frac{2U_0}{\pi m} \left(\sin(\pi m d/h) - \sin(\pi m(1 - d/h)) \right) - \frac{2gh(1 - (-1)^m)}{\pi^2 m^2}. \quad (10)$$

Проаналізуємо, як отриманий розв'язок залежить від параметрів системи.

II. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Температурна залежність отриманого розв'язку пов'язана насамперед із залежністю від температури параметра κ , що входить у вираз (5). Зокрема загальноприйнятим є припущення про скейлінгову залежність цього параметра від температури, тобто $\kappa \sim \tau^\nu$, де позначено через $\tau = (T - T_C)/T_C$ безрозмірне відхилення температури T від критичного значення T_C , а ν є критичним індексом, який для значного класу ординарних рідин становить величину близько $\nu \approx 0.63$ (див., наприклад, [19–22]).

Величина κ^{-1} визначає радіус кореляції системи R_C , тобто $\kappa^{-1} = R_C$. Фактично, критерієм того, що система просторово обмежена, є умова співвідносності радіуса кореляції з лінійними розмірами системи, тобто в цьому випадку $R_C \sim \min(R, h)$. Вплив температури на статистичні характеристики і, зокрема, на рівноважний розподіл рідини в кюветі будемо досліджувати на рівні залежності розв'язку (5) від параметра κ .

Якщо $R < h$ (а розглядатимемо саме такий випадок), то система стає просторово обмеженою (тобто має розглядатися як просторово обмежена), коли радіус кореляції R_C порівняний з характерними лінійними розмірами системи (у цьому випадку це радіус циліндра R), тобто $R_C > R$. Тому близькість до критичного стану можна визначати за значенням безрозмірного параметра κR . Загальноприйнято вважати, що при $\kappa R > 1$ система перебуває в позакритичному стані, а критичний стан буває при $\kappa R \rightarrow 0$. Тут слід узяти до уваги, що значення $\kappa R = 0$ відповідає критичному стану об'ємної фази, тобто критичному стану просторово необмеженої системи [23]. Для

просторово обмежених систем відбувається зсув критичних параметрів (порівняно з просторово необмеженими системами), однак тут цей ефект не принциповий [16–18]. Проте ще раз наголосимо, що тут і далі під критичним станом маємо на увазі саме критичну точку об’ємної фази.

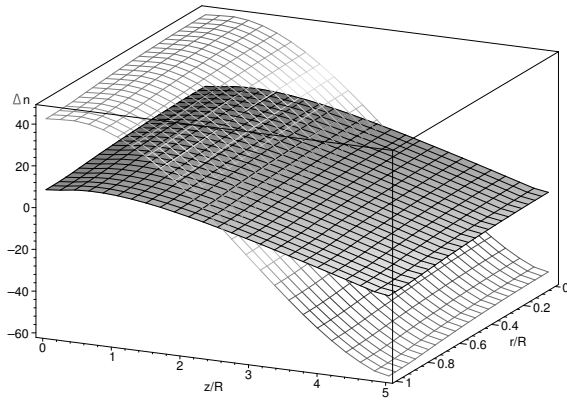


Рис. 1. Розподіл густини (величина $\Delta n = \delta\rho b/R$) для значень $\kappa R = 1$ (поверхня) та $\kappa R = 0$ (сітка). Параметри $d = 0.2R$, $U_0/(gh) = 1$, $h/R = 5$. В критичному стані (сітка) розподіл густини більш неоднорідний, ніж в позакритичному стані (поверхня).

На рис. 1 наведено профілі розподілів густини для значень $\kappa R = 1$ (позакритичний стан) та $\kappa R = 0$ (критичний стан об’ємної фази). При розрахунках тут і далі прийнято геометричний фактор $h/R = 5$ та параметр дії пристінкового потенціалу $d = 0.2R$. Величину потенціалу U_0 вибирали у порівнянні з характерним значенням гравітаційного потенціалу. Для наведених на рис. 1 графіків взято співвідношення $U_0/(gh) = 1$.

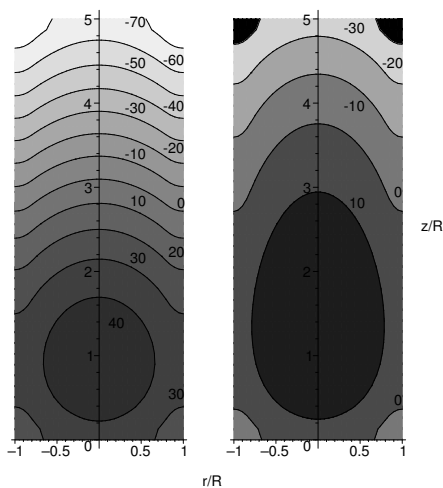


Рис. 2. Контурний графік для профілів густини (величина $\Delta n = \delta\rho b/R$) для значення $\kappa R = 0$ (лівий графік) та $\kappa R = 1$ (правий графік). Параметри $d = 0.2R$, $U_0/(gh) = 3$, $h/R = 5$.

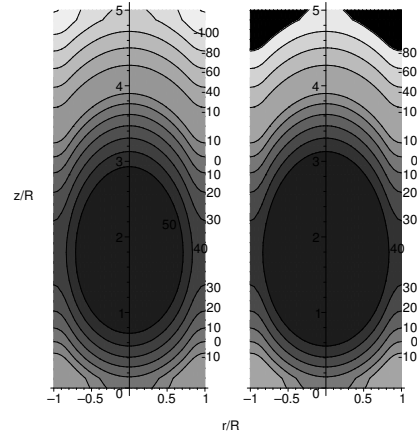


Рис. 3. Контурний графік для профілів густини (величина $\Delta n = \delta\rho b/R$) для значення $\kappa R = 0$ (лівий графік) та $\kappa R = 1$ (правий графік). Параметри $d = 0.2R$, $U_0/(gh) = 10$, $h/R = 5$.

Що стосується самих даних, то маємо суттєве зростання неоднорідності розподілу профілю густини при наближенні системи до критичного стану, як і слід було очікувати. Зрозуміло, що збільшення величини пристінкового потенціалу приводить до того, що ефект взаємодії з поверхнями стає домінуючим порівняно з гравітаційним ефектом, особливо в критичній точці. На рис. 2 наведено контурні графіки для профілів густини системи при значенні пристінкового потенціалу $U_0 = 3gh$ для критичного стану ($\kappa R = 0$) та позакритичного стану ($\kappa R = 1$).

Для порівняння аналогічні залежності зображено на рис. 3 для значення пристінкового потенціалу $U_0 = 10gh$. Характерним є те, що збільшення пристінкового потенціалу нівелює гравітаційний ефект. Для системи за таких обставин характерною є суттєва неоднорідність розподілу густини рідини в широкому інтервалі температур.

ВИСНОВКИ

Отже, в роботі знайдено розподіл густини рідини для просторово обмеженої системи з геометрією обмеженого циліндра. Окремо проаналізовано вплив на розподіл густини в системі гравітаційного поля та пристінкового потенціалу спеціального виду. Показано, що при наближенні до критичного стану система характеризується суттєвою неоднорідністю розподілу густини. Збільшення пристінкового потенціалу приводить до розширення температурного діапазону (ширини критичної зони), у якому нерівномірність розподілу значна.

Отримані результати можуть бути корисними при обробці експериментальних даних щодо розсіяння нейтронів рідкими, просторово обмеженими системами.

- [1] И. Р. Юхновский, М. Ф. Головки, *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наук. думка, Киев, 1980).
- [2] Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика* (Наука, Москва, 1971).
- [3] A. V. Chalyi, *Sov. Sci. Rev. A. Phys.* **16**, 103 (1992).
- [4] Л. А. Булавин, Д. А. Гаврюшенко, В. М. Сысоев, *Журн. физ. хим.* **70**, 559 (1996).
- [5] Л. А. Булавин, Д. А. Гаврюшенко, В. М. Сысоев, *Журн. физ. хим.* **70**, 1525 (1996).
- [6] Л. А. Булавин, Д. А. Гаврюшенко, В. М. Сысоев, *Журн. физ. хим.* **70**, 2102 (1996).
- [7] А. Н. Васильев, *Теор. мат. физ.* **151**, 149 (2007).
- [8] О. М. Васильев, *Журн. физ. докл.* **13**, 1001 (2009).
- [9] И. М. Франк, *Усп. физ. наук* **161**, 109 (1991).
- [10] Л. А. Булавин, *Нейтронные исследования динамики жидкостей* (Вища школа, Київ, 1977).
- [11] Л. А. Булавин, Т. В. Кармазина, В. В. Клепка, В. І. Слісенко, *Нейтронна спектроскопія конденсованих середовищ* (Академперіодика, Київ, 2005).
- [12] В. Я. Антонченко, А. С. Давыдов, В. В. Ильин, *Основы физики воды* (Наукова думка, Київ, 1991).
- [13] I. Brovchenko, A. Geiger, A. Oleinikova, D. Paschek, *Eur. Phys. J. E* **12**, 69 (2003).
- [14] I. Brovchenko, A. Oleinikova, in *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology*, edited by M. Rieth, W. Schommers **1**, 1 (2005).
- [15] К. Крокстон, *Физика жидкого состояния* (Мир, Москва, 1978).
- [16] J. L. Cardy, *Finite Size Scaling* (North-Holland, Amsterdam, 1988).
- [17] V. Privman, *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems* (World Scientific, Singapore, 1990).
- [18] K. Binder, *Ann. Rev. Phys. Chem.* **43**, 33 (1992).
- [19] М. А. Анисимов, *Критические явления в жидкостях и жидких кристаллах* (Наука, Москва, 1987).
- [20] А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов* (Наука, Москва, 1982).
- [21] Ш. Ма, *Современная теория критических явлений* (Мир, Москва, 1973).
- [22] В. П. Воронов, В. М. Булейко, *Журн. эксп. теор. физ.* **113**, 1071 (1998).
- [23] A. V. Chalyi, *J. Mol. Liq.* **58**, 179 (1993).

DENSITY DISTRIBUTION IN A CYLINDRICAL SAMPLE AT THE CRITICAL STATE

A. N. Vasilev¹, P. I. Gordijchuk²

¹*Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics,
Department for Theoretical Physics, 64, Volodymyrska Str., Kyiv, UA-01601, Ukraine*

²*National Technical University of Ukraine "Kyiv Polytechnic Institute",
Intercollegiate College of Medical Engineering, Department of Biomedical Engineering,
16/2, Yanhelya St., Kyiv, UA-03056, Ukraine
e-mail: vasilev@univ.kiev.ua*

In this paper we solve the problem of density profile the calculation in a finite-size liquid system of cylindrical geometry under the influence of external field. We investigate some peculiarities of this distribution in close vicinity to the critical state of the system. We show that even a short-range potential can cause in the critical state a significant non-uniformity in distribution of liquid in a sample.