Faz Geçişlerinin Nitel Tanımı: Kritik Üsteller

Gülenay AKGÖBEK[1], E.Öznur YILDIRIM[2], Atilla GÜLEÇ[2], Erhan AKIN[2], Ülfet ATAV[2]

Özet: Çok parçacıktan oluşan sistemler, parçacıklar arasındaki etkileşimler dolayısıyla parçacıkların ortaklaşa hareket etmeleri sonucunda kritik noktalarında faz geçişine uğrarlar. Bu tür kritik olaylar, çeşitli modeller yardımıyla nicel olarak incelenebilmektedir. Ancak, başlıkta da verildiği gibi bu tür olaylar, kritik üsteller aracılığıyla nitel olarak da ifade edilebilmektedir. Bu çalışmada, kritik üstellerin tanımı, aralarındaki ilişkiler ve saf sıvı sistemleri ile manyetik sistemler için deneysel veriler sunulmuştur.

Anahtar Kelimeler: Kritik olaylar, Faz geçişleri, Kritik üsteller.

The Qualitative Description of The Phase Transitions: Critical Exponents

Abstract: The interactions between the particles of a many body system result in a collective motion of the particles and these in turn cause the many particle system to experience a phase transition near their critical points. These kind of critical phenomena can be quantitatively analysed by a variety of models. However, these phenomena can also be qualitatively defined by critical exponents, as implied in the title. In this study, a description of the critical exponents was followed by a discussion of the relations between them. Also, some experimental data on pure liquids and magnetic systems were presented.

Key Words: Critical phenomena, Phase transitions, Critical exponents.

Giriş

Faz geçişleri teorisinde başlıca araştırma problemlerinden biri, V hacmi içerisinde bulunan N parçacıklı makroskopik bir sistemin kritik nokta (örneğin, T_c kritik sıcaklığı, P_c kritik basıncı, ρ_c kritik yoğunluğu vb.) civarındaki davranışının incelenmesidir. Böyle bir sistemin, kritik noktanın altında, kritik nokta civarında, kritik noktanın üstünde farklı ya da karışık fazlarda bulunmasına (yani, sistemin bir fazdan başka bir faza geçişine) sebep olan en önemli unsur, parçacıklar arasındaki etkileşimlerdir. Kısa ya da uzun menzilli bu etkileşimlerin varlığı altında, sistemin termodinamik davranışını betimleyen termodinamik fonksiyonları, etkileşimlerin olmadığı durumun aksine, kritik nokta civarında analitik süreksizlikler ve tekillikler gösterirler.

Herhangi bir makroskopik sistemin kritik davranışı, parçacıkları arasında mevcut olan kısa ya da uzun menzilli etkileşimlerin varlığı altında, tüm parçacıkların ortaklaşa hareketinin bir sonucudur ve dolayısıyla bu tür fiziksel olayların incelenmesiyle ilişkili matematiksel problemler her yönüyle son derece güçtür. Yine de, bazı matematiksel güçlüklere rağmen, sistemin parçacıklarının ortaklaşa hareketinden kaynaklanan karakteristik özelliklerini ortaya koyabilen, fakat hesapları

[1] Selçuk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 42049 KONYA
[2] Selçuk Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 42049 KONYA

kolaylaştırmak için parçacıklar arasındaki etkileşimlerin oldukça basitleştirildiği çeşitli modeller öne sürülebilir. Faz geçişlerinin nicel olarak incelenebildiği bu modellerden bazıları şunlardır: Heisenberg modeli, XY modeli, Ising modeli, n-vektör modeli, örgü gazı, ikili alaşımlar, Potts modeli, Gauissien ve küresel modeller vb. [1] .

Kritik olayları nitel olarak betimlemek amacıyla kritik üsteller adı verilen nicelikler tanımlanabilir. Bu amaçla, verilen bir sisteme ait olan çeşitli fiziksel niceliklerin kritik noktada tekilliklere sahip olması nedeniyle sistemin kritik nokta civarındaki davranışının nitel yapısını belirleyen ve kritik üsteller ile karakterize edilen kuvvet yasaları kullanılabilir. Bu durum, sistemin termodinamik fonksiyonlarının kritik nokta civarında seri açılımı biçiminde ifade edilebilmesi ile mümkündür. .

Kritik Üstellerin Tanımlanması

Gözlenen herhangi bir makroskopik sistemin kritik nokta civarındaki davranışının incelenildiğini düşünelim. Söz konusu sistemin termodinamik davranışını betimleyen termodinamik fonksiyonları kritik nokta civarında seri açılım biçimindeki fonksiyonlarla ifade edilebilir. Bunun için, ilgilenilen termodinamik değişkenin ilgili kritik noktadan (örneğin, sistemin T sıcaklığı ve T_c kritik sıcaklığı) ne kadar farklı olduğunun bir ölçüsü olan ve indirgenmiş değişken olarak tanımlanan ;

$$\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c} \qquad (1)$$

niceliği cinsinden sistemin termodinamik fonksiyonları seriye açılabilir. Dolayısıyla, kritik nokta civarında ilgili fonksiyonları,

$$f(\varepsilon) = A\varepsilon^{\lambda}(1 + B\varepsilon^{y} + ...) \qquad (2)$$

biçimindeki bir seri açılım fonksiyonu olarak yazmak mümkündür. Burada A, B, Λ sabitler olup $y > 0$' dır. $T < T_c$ iken $T \to T_c$ (sıcaklığın kritik noktaya alttan yaklaşması) ve $T > T_c$ iken $T \to T_c$ (sıcaklığın kritik noktaya üstten yaklaşması) durumunda $\varepsilon \to 0$ olur. $T = T_c$ için $\varepsilon = 0$ 'dır. Bu durumda, (2) ile ifade edilen fonksiyon süreksizdir ve tekil özellikler gösterir. Dolayısıyla, bu fonksiyon için kritik üstel,

$$\lambda = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\ln f(\varepsilon)}{\ln \varepsilon} \qquad (3)$$

biçiminde tanımlanır. $\lambda > 0$ ise, $f(\varepsilon)$ fonksiyonu kritik nokta civarında sonsuza ıraksayacaktır. Şekil 1' de, $f(\varepsilon) = \varepsilon^{\lambda}$ fonksiyonunun $\lambda = -5/2,\ -2,\ -3/2,\ 3/2,\ 2,\ 5/2$ değerleri için grafiği çizilmiştir. $\lambda = 0$ olması durumunda, $f(\varepsilon)$ fonksiyonu için $f(\varepsilon) = A\left|\ln\varepsilon\right| + B$ veya $f(\varepsilon) = A + B\varepsilon^{1/2}$ biçiminde verilebilecek farklı fonksiyonel ifadeler geçerli olabilir. Böyle hallerde modifiye bir üstelin tanımlanması gerekir. Bunun için,

$$f^{[j]}(\varepsilon) = \frac{d^j f(\varepsilon)}{d\varepsilon^j} \qquad (4)$$

türevleri ıraksayacak şekilde seçilen en küçük j sayısı göz önüne alınarak modifiye üstel

$$\lambda' = j + \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\ln\left| f^{[j]}(\varepsilon)\right|}{\ln \varepsilon} \qquad (5)$$

biçiminde tanımlanır [2]. Şekil 2 'de $\lambda = 0$ olması halinde karşılaşılan olası durumlar olan $f(\varepsilon) = |\ln \varepsilon|$ ve $f(\varepsilon) = 1 - e^{\lambda'}$ fonksiyonlarının grafiği çizilmiştir. Burada kritik nokta için sıcaklık seçilmiştir. Bununla birlikte kritik nokta için, basınç, yoğunluk, manyetik alan vb. seçilerek ilgili kritik üsteller tanımlanabilir. Dolayısıyla, sistemin kritik noktaya nasıl yaklaştığına bağlı olarak tanımlanabilecek çok sayıda farklı kritik üstel mevcuttur. Bu üstellerden çoğunlukla karşılaşılanlar şunlardır:

(i) Saf sıvı sistemleri için P basıncının P_c kritik değerinden sapması olan $(P - P_c)$ niceliği, kritik izoterm boyunca kritik noktaya yaklaşılırken $(V - V_c)$ niceliğinin dördüncü kuvveti biçiminde değişecektir. Bu durum,

$$\frac{P - P_c}{P_c^0} = A_\delta \left| \frac{\rho - \rho_c}{\rho_c} \right|^\delta sign(\rho - \rho_c), \quad T = T_c \tag{6}$$

olacak şekilde bir kritik üstel tanımlanarak ifade edilebilir. Burada P_c kritik basınç, ρ_c kritik yoğunluk, A_δ bir sabit ve P_c^0 kritik yoğunluk ve sıcaklıkta ideal gaz basıncıdır. δ üsteline *kritik izotermin derecesi* adı verilir.

Benzer şekilde manyetik sistemler için, δ üsteli kritik izoterm boyunca manyetizasyonun manyetik alanla değişimini tanımlar. Bu durum,

$$\frac{H}{H_c^0} = B_\delta \left| \frac{M_H(T_c)}{M_0(0)} \right|^\delta \tag{7}$$

biçiminde ifade edilir. Burada m_0 spin başına manyetik moment olmak üzere $H_c^0 = kT/m_0$, B_δ bir sabit ve $M_0(0)$ ise $T = 0$ ve $H = 0$ iken manyetizasyondur.

(ii) Saf sıvı sistemleri için, birarada bulunma eğrisi (co-existence curve) boyunca kritik noktaya yaklaşıldığında $(T - T_c)$ sıcaklık sapmasının $(V - V_c)$ niceliğinin yaklaşık olarak üçüncü kuvveti biçiminde değiştiği bulunmuştur [3] . Söz konusu durum,

$$\frac{\rho_\lambda - \rho_c}{\rho_c} = A_\beta(-\varepsilon)^\beta \tag{8}$$

olacak şekilde bir β üsteli tanımlanarak ifade edilebilir. Burada ρ_λ , $T < T_c$ sıcaklığında sıvının yoğunluğu, ρ_g ise $T < T_c$ sıcaklığında gazın yoğunluğu olup her ikisi de birarada bulunma eğrisi üzerinde hesaplanır; A_β bir sabittir. $(\rho_\lambda - \rho_g)$ niceliği sistemin düzen parametresi olup kritik noktanın üstünde sıfır altında ise sıfırdan farklıdır. β üsteline *birarada bulunma eğrisinin derecesi* adı verilir.

Benzer şekilde manyetik sistemler için β üsteli, dış alan mevcut değil iken manyetizasyonun kritik noktadaki değerine nasıl yaklaştığını tanımlar. Bu durum,

$$\frac{M_0(T)}{M_0(0)} = B_\beta(-\varepsilon)^\beta \tag{9}$$

biçiminde bir β üsteli tanımlanarak ifade edilir. Burada B_β bir sabittir. Manyetik sistemler için β üsteline *Manyetizasyon üsteli* adı verilir.

(iii) Saf sıvı sistemleri için, kritik izokor $(V = V_c)$ boyunca $T \to T_C$ olurken sabit hacimdeki ısı kapasitesi logaritmik bir ıraksamaya sahip olmaktadır. Bu durum,

$$C_V = \begin{cases} A_{\alpha'}(-\varepsilon)^{-\alpha'}, \ T < T_c, \ \rho = \rho_c \\ A_{\alpha'}(+\varepsilon)^{-\alpha}, \ T > T_c, \ \rho = \rho_c \end{cases} \qquad (10)$$

olacak şekilde ısı kapasitesi için bir α üsteli tanımlanarak ifade edilebilir. Burada $A_{\alpha'}$ ve A_α sabitlerdir.

Benzer şekilde manyetik sistemler için, dış manyetik alan olmadığında $(H=0)$ sistemin ısı kapasitesi,

$$C_H(H=0) = \begin{cases} B_{\alpha'}(-\varepsilon)^{-\alpha'}, \ T < T_c \\ B_{\alpha'}(+\varepsilon)^{-\alpha}, \ T > T_c \end{cases} \qquad (11)$$

biçiminde yazılabileceğinden α' ve α üstelleri tanımlanır. Burada $B_{\alpha'}$ ve B_α sabitlerdir.

(iv) Saf sıvı sistemleri için, izotermal sıkıştırılabilirlik,

$$\frac{\kappa_T}{\kappa_T^0} = \begin{cases} A_{\gamma'}(-\varepsilon)^{-\gamma'}, \ T < T_c, \ \rho = \rho_\lambda(T) \ \text{veya} \ \rho_g(T) \\ A_\gamma(+\varepsilon)^{-\gamma}, \ T > T_c, \ \rho = \rho_c \end{cases} \qquad (12)$$

biçiminde ıraksayacağından γ' ve γ üstelleri tanımlanabilir. Burada $A_{\gamma'}$ ve A_γ sabitlerdir. $T < T_c$ için kritik noktaya birarada bulunma eğrisi boyunca, $T > T_c$ için kritik izokor boyunca yaklaşılır.

Benzer şekilde manyetik sistemler için, kritik nokta civarında manyetik alınganlık,

$$\frac{\chi_T}{\chi_T^0} = \begin{cases} B_{\gamma'}(-\varepsilon)^{-\gamma'}, \ T < T_c \\ B_\gamma(+\varepsilon)^{-\gamma}, \ T > T_c \end{cases} \qquad (13)$$

olacaktır. Burada $B_{\gamma'}$ ve B_γ sabitler olup χ_T^0 niceliği ise kritik sıcaklıkta etkileşmeyen sistemin manyetik alınganlığıdır.

Kritik Üsteller Arasındaki İlişkiler

Faz geçişlerinin nitel tanımı için kullanılabilen söz konusu kritik üsteller tamamen birbirinden bağımsız nicelikler değildir. Gerçekte, bunlar arasında eşitsizlik (veya eşitlikler) olarak ifade edilen ilişkiler vardır. Kritik üsteller arasındaki bu tür ilişkiler, termodinamik fonksiyonların incelenmesiyle ortaya konulabilir. İlk olarak, Rushbrooke [4] tarafından elde edilen eşitsizliği göz önüne alalım. Bu durumda, sabit H alanı ve sabit M manyetizasyonu için özgül ısılar arasındaki fark,

$$C_H - C_M = -T\left(\frac{\partial H}{\partial M}\right)_M \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H = T\chi^{-1}\left\{\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H\right\}^2 \qquad (14)$$

biçiminde yazılabilir. $C_M \geq 0$ olduğundan $H \to 0$ ve $T \to T_c$ $(T < T_c)$ için,

$$(T_c - T)^{2-(\alpha'+2\beta+\gamma')} \geq DT_c \qquad (15)$$

ifadesi bulunur. Burada D pozitif bir sabittir. $(T - T_c)$ niceliği istenildiği kadar küçük yapılabileceği için (15) ifadesi, $(\alpha' + 2\beta + \gamma') < 2$ ise geçerli olmayacaktır. Bu nedenle,

$$(\alpha' + 2\beta + \gamma') \geq 2 \tag{16}$$

olmalıdır. (16) ifadesi ile verilen eşitsizliğe *Rushbrooke eşitsizliği* adı verilir. Benzer şekilde Helmholtz serbest enerjisi göz önüne alınarak,

$$\alpha' + \beta(\delta + 1) \geq 2 \tag{17}$$

Griffiths eşitsizliği [5] elde edilir. Ayrıca,

$$\gamma' \geq \beta(\delta - 1) \tag{18a}$$
$$\gamma \geq (2 - \alpha)(\delta - 1)/(\delta + 1) \tag{18b}$$

eşitsizlikleri de yazılabilir. Bu tür eşitsizliklerin tam listesi Griffiths [5, syf.102] tarafından verilmiştir.

Sistemdeki spin-spin (veya yoğunluk-yoğunluk) korelasyonlarının erişebildiği mesafelerin bir ölçüsü olan ξ niceliğinin $T = T_c$ kritik noktasındaki ıraksaması, dış alan mevcut değil iken,

$$\xi \approx \begin{cases} \varepsilon^{-\nu}, & (\varepsilon > 0) \\ \varepsilon^{-\nu'}, & (\varepsilon < 0) \end{cases} \tag{19}$$

ve $g(r)$ korelasyon fonksiyonu,

$$g(r) \approx r^{-(d-2+\eta)}, \quad (\varepsilon = 0) \tag{20}$$

biçiminde olduğundan korelasyon mesafesi ve korelasyon fonksiyonu için ν ve η kritik üstelleri tanımlanır. Burada d sistemin boyutluluğudur. Kritik bölgede sistemin manyetik alınganlığı için,

$$\chi \approx \xi^{2-\eta} \tag{21}$$

yazılabileceğinden,

$$\gamma \leq (2 - \eta)\nu \tag{22}$$

sonucu bulunur. (22) ifadesi ile verilen eşitsizliğe *Fisher eşitsizliği* [6] adı verilir. $f(\varepsilon)$ yoğunluk fonksiyonu,

$$f(\varepsilon) \approx \varepsilon^{d\nu} \approx \varepsilon^{2-\alpha} \tag{23}$$

biçiminde ifade edilebileceğinden,

$$d\nu \geq (2 - \alpha) \tag{24a}$$
$$d\nu' \geq (2 - \alpha') \tag{24b}$$

Josephson eşitsizlikleri [7] bulunur. Ayrıca,

$$(2-\eta) \leq d(\delta-1)/(\delta+1) \quad (25)$$

Buckingham-Gunton eşitsizliği [8] yazılabilir.

Sonuçlar ve Tartışma

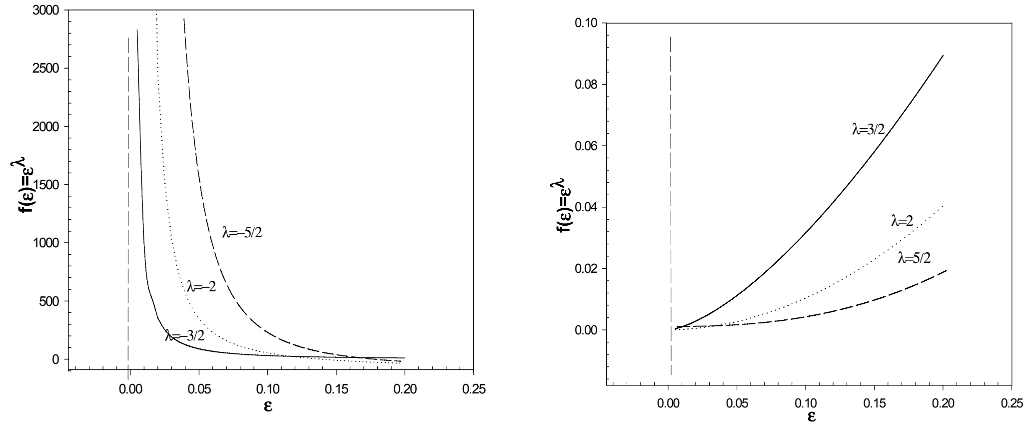
Kritik üsteller arasındaki ilişkiler dikkate alındığında kritik üstellerden sadece herhangi ikisi bağımsız iken diğer üstellerin bunlar cinsinden ifade edilebileceği görülebilir.Çeşitli türden özelliklere sahip sistemler veya bu sistemler arasında belirli özelliklere dayalı olarak yapılan sınıflandırmalar sonucu ortaya çıkan kategoriler ele alındığında , belirli bir kategori içindeki bir sistemden diğerine (veya içerdiği sistemlerin özellikleri birbirinden çok farklı olsa bile bir kategoriden diğerine) kritik üstellerin çok az fark ettiği ortaya çıkmaktadır. Kritik üsteller, van der Waals denklemi veya Ginzburg-Landau teorisi kullanılarak kolayca hesaplanabilir. Sözü edilen bu teorilerde sistemi oluşturan parçacıklardan herhangi birinin geriye kalan parçacıkların oluşturduğu ortalama alan içerisinde hareket ettiği temel varsayımı geçerli olduğu için bu teorilere ortalama alan teorileri adı verilir ve dolayısıyla hesaplanan kritik üsteller doğru değildir; daha doğru değerler için scaling hipotezi, renormalizasyon grup teorisi kullanılmalıdır. Saf sıvı ve manyetik sistemler için ilgili kritik üstellerin deneysel değerleri Tablo 1'de verilmiştir [1,2].

Kaynaklar

1-Pathria, R.K., **Statistical Mechanics.** Butterworth-Heinemann, Sec. Ed., (1996).
2-Reichl, L.E., **A Modern Course in Statistical Physics.** John Wiley and Sons, Sec. Ed., (1998).
3-Guggenheim, E.A., **The Principle of Corresponding States.** J. Chem. Phys. 13 (1945) 253.
4-Rushbrooke, G.S., **On the Thermodynamics of the Critical Region for the Ising Problem.** J. Chem. Phys. 39 (1963) 842.
5-Griffiths, R.B., **Rigorous Results and Theorems.** İn **Phase Transitions and Critical Phenomena.** Eds. C. Domb and M.S. Green, Academic Press, London, Vol.1, pp. 7-109, (1972).
6-Fisher, M.E., **Rigorous Inequalities for Critical-Point Correlation Exponents.** Phys. Rev. 180 (1969) 594.
7-Josephson, B.D., **Inequality for the Spesific Heat: I. Derivation., Inequality for the Spesific Heat: II. Application to Critical Phonemena.** Proc. Phy. Soc. 92 (1967) 269, 276.
8-Buckingham, M.J. and Gunton, J.D., **Correlations at the Critical Point of the Ising Model.** Phys. Rev. 178 (1969) 848.

Tablo1. Kritik Üsteller İçin Elde Edilen Deneysel Değerler.

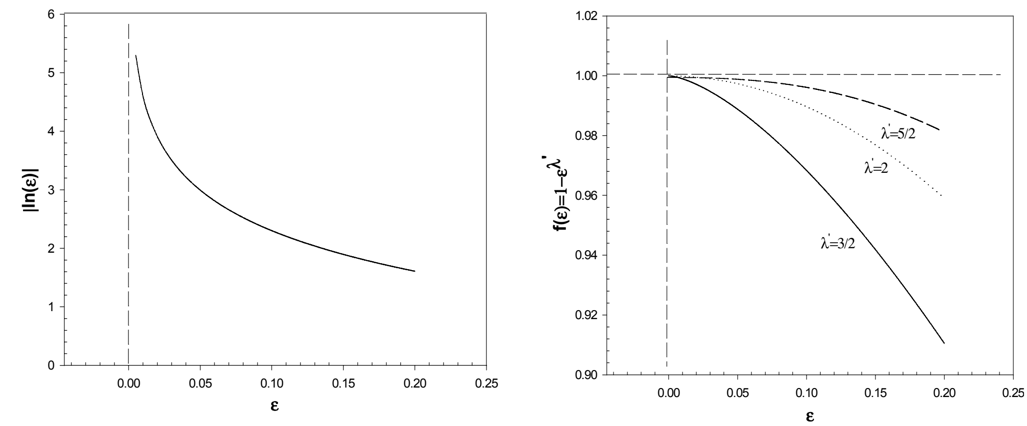
Kritik Üstel	Saf Sıvı Sistemleri	Manyetik Sistemler
δ	$6>\delta>4$	$6\geq\delta\geq4$
β	0.32-0.35	0.3-0.36
α',α	0.1-0.2	0.0-0.2
γ',γ	1.1-1.3	1.0-1.4
ν',ν	—	0.62-0.68
η	—	0.03-0.15



(a) (b)

Şekil 1. (a) $f(\varepsilon)=\varepsilon^{\lambda}$ fonksiyonunun $\lambda=-5/2,\ -2,\ -3/2$ değerleri için grafiği.

(b) $f(\varepsilon)=\varepsilon^{\lambda}$ fonksiyonunun $\lambda=5/2,\ 2,\ 3/2$ değerleri için grafiği.



(a) (b)

Şekil 2. $\lambda=0$ olması durumunda olası durumlar olan **(a)** $f(\varepsilon)=\left|\ln(\varepsilon)\right|$ fonksiyonunun ve, **(b)** $f(\varepsilon)=1-e^{\lambda'}$ fonksiyonunun grafikleri.