

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-99-08U

М.В.Токарчук, О.Є.Кобрин, Й.А.Гуменюк

КОЕФІЦІЄНТИ ПЕРЕНОСУ СУМІШЕЙ ГУСТИХ ГАЗІВ
ЗАРЯДЖЕНИХ ТА НЕЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК

УДК: 533; 536.75; 537.75

РАС: 05.60.+w; 05.70.Ln; 05.20.Dd; 52.25.Dd; 52.25.Fi

Коефіцієнти переносу сумішей густих газів заряджених та незаряджених частинок

М.В.Токарчук, О.Є.Кобрин, Й.А.Гуменюк

Анотація. Розглянуто кінетичне рівняння Енскога-Ландау для густих багатосортних систем заряджених твердих кульок. За допомогою методу Чепмена-Енскога знайдено його нормальний розв'язок в першому наближенні. На основі отриманих виразів для коефіцієнтів переносу проведено їх чисельний розрахунок для дво- і трисортних сумішей нейтральних і заряджених частинок. Деякі результати порівнюються з наявними експериментальними даними.

Transfer coefficients of dense gaseous mixtures of charged and non-charged particles

M.V.Tokarchuk, O.E.Kobryn, Y.A.Humenyuk

Abstract. The Enskog-Landau kinetic equation for dense many-component systems of hard charged spheres is considered. Using the standard Chapman-Enskog method the normal solution to this equation in the first approximation is found. Numerical calculations for two- and three-component mixtures of neutral and charged particles are carried out on the basis of the found expressions for transfer coefficients. Some of results are compared with the available experimental data.

Подается в Журнал Фізичних Досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

1. Вступ

Дослідження процесів переносу в густих слабкоіонізованих чи повністю йонізованих багатокомпонентних газах із наявністю від'ємних йонів є актуальними з точки зору вдосконалення чи створення нових газових лазерів, плазмохімічних реакторів, синтезу озону, очистки повітря від окисів азоту, вуглецю, сполук хлору і газорозрядних ламп та ін. Зокрема, це актуально для реалізації ідеї руйнування фреонів у нижніх шарах атмосфери за допомогою НВЧ розрядів. Вагомі результати у вивченні елементарних зіткнень заряджених частинок (електронів, йонів) з атомами і молекулами та електромагнітних процесів у газорозрядній плазмі, плазмохімічних процесів у багатокомпонентних густих частково чи повністю йонізованих газах (N_2 , CO , CO_2 , O_2 , He , Ar , Kr , Xe) представлено в багатьох монографіях [1–7], оглядах [8–11] та окремих оригінальних статтях [12–16]. Однією з центральних теоретичних проблем у цих дослідженнях є вивчення і розрахунок коефіцієнтів переносу — в'язкості, теплопровідності, взаємної дифузії та термодифузії — атомів, молекул, йонів та електронів, їх електропровідності з врахуванням характеру міжчастинкових взаємодій у газових сумішах. Таким розрахунком присвячено недавні роботи Мерфі [17–19] для конкретних газових сумішей.

Традиційний інтерес до багатокомпонентних систем, зокрема, до бінарних сумішей густих газів, рідин та плазми, в останні роки підсилюється тим, що суттєвий поступ у розвитку обчислювальної техніки дозволив значно доповнювати теорію результатами математичного моделювання. Кінетичні коефіцієнти нерівноважних систем досліджувались різними методами: по теорії Бхатнагара-Гросса-Крука [21], Гріна-Кубо [22,23], методом Фроста [24], при поєднанні кінетики й рівнянь нелінійної гідродинаміки [25], в однорідинному наближенні [26,27]. Здійснено математичну побудову розширеної термодинаміки густих газів і рідин (зокрема сумішей із твердих кульок в рамках теорії RET [20]) [28], доведено термодинамічну сумісність кінетичних рівнянь типу Енскога для M -компонентних систем та Енског-подібних кінетичних рівнянь для реагуючих сумішей [29,30], порівняно результати макроскопічних і мікроскопічних теорій [31,32]. Одночасно з удосконаленням методів розрахунку кінетичних коефіцієнтів відбувалась також оптимізація чисельних моделювань Монте-Карло та молекулярної динаміки [33–35]. У деяких випадках чисто теоретичні моделі й задачі носили також прикладний характер: модель Гросса-Джексона [36], обернена задача теплопровідності [37],

ефективні коефіцієнти переносу [38–40].

Кінетичне рівняння Енскога-Ландау для однокомпонентної системи заряджених твердих кульок було запропоновано в роботі [20]. Воно добре описує процеси переносу в помірно густих системах, а інтеграл зіткнень такого рівняння не має неаналітичності на малих відстанях. Чисельні розрахунки для зсувної в'язкості η та теплопровідності λ на основі нормального розв'язку цього рівняння методом Чепмена-Енскога показали добрий збіг теорії з експериментальними даними [41]. В [43,44] для цього рівняння було знайдено нестационарний розв'язок і коефіцієнти переносу методом граничних умов [45], які у випадку стаціонарного процесу збігалися з результатами [41]. Однак, як і будь-яка однокомпонентна система, вона залишалась лише модельною [46,47].

Тому природним було бажання розвинути теорію [20,41] на багатокомпонентні системи. Якщо в роботах [21–40] і розраховувались кінетичні коефіцієнти (такі як в'язкість η , електропровідність σ , теплопровідність λ , коефіцієнти взаємної дифузії D_{ab} та термодифузії D_a^T), то скрізь відмічається, що найкращий збіг з експериментальними даними (а також МК та МД) є для незаряджених систем і при відносно невисоких густинах. В [34], зокрема, відмічається, що при високих густинах збіг поганий (теорія не працює). А в [35] на основі результатів МК підсумовується, що η краще збігається з експериментом ніж λ у переважній більшості випадків. Взагалі, гірша узгодженість теорії й експерименту для теплопровідності λ відома давно. Пов'язане це перш за все з тим, що зі збільшенням густини системи сильно зростає роль міжчастинкових кореляцій, які треба враховувати [48]. Це, у свою чергу, призводить до змін у локальних законах збереження, що використовуються при розв'язуванні кінетичних рівнянь [43].

У даній роботі здійснено розрахунок коефіцієнтів переносу багатосортних густих газів заряджених і незаряджених частинок з врахуванням поляризаційних ефектів на основі кінетичного рівняння Енскога-Ландау. Отримано нормальний розв'язок цього рівняння методом Чепмена-Енскога. Проведено числові розрахунки коефіцієнтів в'язкості, теплопровідності, взаємної дифузії та термодифузії для різних сумішей.

2. Кінетичне рівняння Енскога-Ландау для багатосортних систем заряджених твердих кульок

Розглянемо нерівноважну систему N класичних частинок, котра складається з M сортів заряджених твердих кульок. Через N_a позначатимемо число частинок кожного сорту: $\sum_{a=1}^M N_a = N$. Система займає об'єм V , що не є фіксованим, проте виконується термодинамічна границя:

$$N/V = \text{const}, \quad \text{при } N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty.$$

Позначмо через $z_a e$ заряд частинки сорту a (e — елементарний електричний заряд), а через m_a — її масу. Система в цілому є електро-нейтральною, тобто виконується умова: $\sum_{a=1}^M N_a z_a = 0$. Коли розглядаються лише позитивно йонізовані суміші газів, то вважаємо, що нейтралізаційне поле електронів є континуумом, всюди однаковим, постійним і нечутливим до змін у системі йонів.

В роботах [20,41] із ланцюжка рівнянь Б-Б-Г-К-І з модифікованими граничними умовами в наближенні "парних" зіткнень було отримано кінетичне рівняння Енскога-Ландау для однокомпонентної системи заряджених твердих кульок в компенсаційному полі. Для багатосортних систем заряджених кульок кінетичне рівняння Енскога-Ландау було записано в [42,49], для потенціалів взаємодії:

$$\Phi(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|) \equiv \Phi(r_{ab}) = \Phi^{hs}(r_{ab}) + \Phi^l(r_{ab}), \quad (2.1)$$

$$\Phi^{hs}(r_{ab}) = \lim_{c \rightarrow \infty} \Phi^c(r_{ab}), \quad \Phi^c(r_{ab}) = \begin{cases} c, & r_{ab} < \sigma_{ab} \\ 0, & r_{ab} \geq \sigma_{ab}, \end{cases}$$

$$\Phi^l(r_{ab}) = \begin{cases} 0, & r_{ab} < \sigma_{ab} \\ \frac{z_a z_b e^2}{r_{ab}}, & r_{ab} \geq \sigma_{ab}, \end{cases}$$

де $\sigma_{ab} = (\sigma_a + \sigma_b)/2$, а σ_a, σ_b — діаметри твердих кульок.

Далекосяжну частину потенціала взаємодії $\Phi^l(r_{ab})$ зарядженої a й незарядженої b частинок можна взяти у вигляді поляризаційного потенціала:

$$\Phi^l(r_{ab}) = \begin{cases} 0, & r_{ab} < \sigma_{ab} \\ -\frac{z_a \alpha_b e^2}{2r_{ab}^4}, & r_{ab} \geq \sigma_{ab}, \end{cases}$$

де α_b — поляризованість нейтральної частинки.

Кінетичне рівняння Енскога-Ландау має вигляд:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_a} \right] f_a(x_a; t) = \sum_{b=1}^M \left[I_E^{(0)}(f_a, f_b) + I_E^{(1)}(f_a, f_b) + I_{MF}(f_a, f_b) + I_L(f_a, f_b) \right]. \quad (2.2)$$

Тут і надалі одночастикову функцію розподілу сорту a будемо позначати через f_a , $x_a \equiv (\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_a)$.

Інтеграли зіткнень, що в правій частині, описують вклади від певного типу міжчастинкової взаємодії. Доданки $I_E^{(0)}(f_a, f_b)$ та $I_E^{(1)}(f_a, f_b)$ є відповідно нульовим та першим членами розкладу інтеграла зіткнень Енскога в ряд по нелокальності [42,49]:

$$I_E^{(0)}(f_a, f_b) = \int d\mathbf{v}_b d\omega v_{ab} g_2^{ab}(\sigma_{ab}|n, \beta) [f_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}'_a, t) f_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}'_b, t) - f_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_a, t) f_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_b, t)], \quad (2.3)$$

$$I_E^{(1)}(f_a, f_b) = \sigma_{ab}^3 \int d\mathbf{v}_b d^2 k_{ab} \theta(\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}) (\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}) \left\{ g_2^{ab}(\mathbf{k}_{ab}|n, \beta) \times \right. \\ \times \mathbf{k}_{ab} \cdot [f_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}'_a, t) \nabla f_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}'_b, t) + f_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_a, t) \nabla f_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_b, t)] + \\ \left. + \frac{1}{2} (\mathbf{k}_{ab} \cdot \nabla g_2^{ab}(\mathbf{k}_{ab}|n, \beta)) [f_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}'_a, t) f_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}'_b, t) + f_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_a, t) f_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_b, t)] \right\}. \quad (2.4)$$

Тут $d\omega$ — диференціальний переріз розсіяння; \mathbf{v}_{ab} — відносна швидкість частинок; $g_2^{ab}(\sigma_{ab}|n, \beta)$ — значення квазірівноважної парної функції розподілу на контакті, яке залежить від концентрації n та оберненої температури β (надалі ми не будемо явно вказувати цих параметрів); $\mathbf{v}'_a = \mathbf{v}_a + \mathbf{k}_{ab}(\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab})$, $\mathbf{v}'_b = \mathbf{v}_b - \mathbf{k}_{ab}(\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab})$ — швидкості твердих кульок після зіткнення, \mathbf{k}_{ab} — одиничний вектор в напрямку від центра однієї твердої кульки до іншої при їх зіткненні; $\theta(x)$ — одинична функція Хевісайда.

Третій доданок — вклад, розрахований в наближенні теорії середнього поля КМФТ [20,41]:

$$I_{MF}(f_a, f_b) = \frac{1}{m_a} \int d\mathbf{r}_b \frac{\partial \Phi^l(r_{ab})}{\partial \mathbf{r}_a} g_2^{ab}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} f_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_a, t) n_b(\mathbf{r}_b, t), \quad (2.5)$$

де $g_2^{ab}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t)$ — квазірівноважна парна функція розподілу.

Останній є інтегралом зіткнень типу Ландау:

$$I_L(f_a, f_b) = \int d\mathbf{v}_b d\omega v_{ab} [f_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_a^*, t) f_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_b^*, t) - f_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_a, t) f_b(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_b, t)]. \quad (2.6)$$

Тут його представлено спрощено у больцманівській формі з врахуванням $g_2^{ab}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t) \rightarrow 1$ [53]. При розв'язуванні (2.2) методом Чепмена-Енскога така форма є зручною. $\mathbf{v}_a^* = \mathbf{v}_a + \Delta\mathbf{v}_{ab}$, $\mathbf{v}_b^* = \mathbf{v}_b - \Delta\mathbf{v}_{ab}$ — швидкості частинок після кулонівського розсіяння.

$$\Delta\mathbf{v}_{ab} = -\frac{1}{2\mu_{ab}v_{ab}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{ab}} \Phi^l(|\mathbf{r}_{ab}|) \Big|_{r_{ab}=\sqrt{\xi^2+b^2}},$$

μ_{ab} — приведена маса; b — прицільний параметр.

3. Нормальний розв'язок методом Чепмена-Енскога

Щоб знайти нормальні розв'язки кінетичного рівняння (2.2) тим чи іншим методом необхідно використовувати у відповідних наближеннях локальні закони збереження. При цьому, вирази для кінетичних коефіцієнтів в'язкості і теплопровідності будуть визначатися з розрахунків тензора густини потоку імпульсу $\overset{\leftrightarrow}{P}(\mathbf{r}, t)$ та вектора густини потоку енергії $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$ на основі розв'язку для $f_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{v}_a, t)$ та відповідних наближень для функції $g_2^{ab}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t)$. Оскільки будемо шукати такі розв'язки кінетичних рівнянь (2.2), що відповідають лінійним (за градієнтами термодинамічних параметрів) гідродинамічним процесам переносу, то структуру виразів для тензора густини потоку імпульсу $\overset{\leftrightarrow}{P}(\mathbf{r}, t)$ та вектора густини потоку енергії $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$ можна знайти безпосередньо за допомогою кінетичного рівняння (2.2). Для здійснення цієї процедури зручно ввести [20,41] гідродинамічні параметри густини маси, імпульсу та енергії:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{a=1}^M m_a \int d\mathbf{v}_a f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t), \quad (3.1)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{V}(\mathbf{r}, t) = \sum_{a=1}^M \int d\mathbf{v}_a f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t) m_a \mathbf{v}_a, \quad (3.2)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) w(\mathbf{r}, t) = \sum_{a=1}^M \int d\mathbf{v}_a f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t) \frac{m_a}{2} c_a^2, \quad (3.3)$$

де $\mathbf{c}_a(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v}_a - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$ — теплова швидкість частинок сорту a .

Множачи вихідне кінетичне рівняння (2.2) на компоненти “вектора” адитивних інваріантів $\psi = (m_a, m_a \mathbf{v}_a, m_a c_a^2/2)$ та інтегруючи по $d\mathbf{v}_a$, одержимо рівняння для вибраних нами гідродинамічних параметрів:

$$\frac{d\rho(\mathbf{r}, t)}{dt} = -\rho(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{V}(\mathbf{r}, t) \quad (3.4a)$$

— закон збереження маси,

$$\rho(\mathbf{r}, t) \frac{d\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)}{dt} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \overset{\leftrightarrow}{P}'(\mathbf{r}, t) \quad (3.4б)$$

— рівняння руху,

$$\rho(\mathbf{r}, t) \frac{d\mathbf{w}(\mathbf{r}, t)}{dt} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{q}^*(\mathbf{r}, t) - \overset{\leftrightarrow}{P}^*(\mathbf{r}, t) : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{V}(\mathbf{r}, t) + \quad (3.4в)$$

$$+ \sum_{a,b=1}^M \mathbf{V}_a(\mathbf{r}, t) \int d\mathbf{r}_{ab} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{ab}} \Phi^l(r_{ab}) n_a(\mathbf{r}, t) n_b(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{ab}, t)$$

— рівняння переносу кінетичної енергії. Тут

$$\overset{\leftrightarrow}{P}' = \overset{\leftrightarrow}{P}^{kin} + \overset{\leftrightarrow}{P}^{hs} + \overset{\leftrightarrow}{P}^{MF}, \quad \overset{\leftrightarrow}{P}^* = \overset{\leftrightarrow}{P}^{kin} + \overset{\leftrightarrow}{P}^{hs},$$

$$\mathbf{q}^* = \mathbf{q}^{kin} + \mathbf{q}^{hs}, \quad (3.5)$$

$$\mathbf{V}_a(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n_a} \int d\mathbf{v}_a f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t) [\mathbf{v}_a - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t)]$$

— дифузійна швидкість частинок сорту a .

Для відшукування нормальних розв'язків системи кінетичних рівнянь (2.2) методом Чепмена-Енскога [52] за нульове наближення для функції розподілу виберемо локально-максвелівську :

$$f_a^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t) = n_a(\mathbf{r}, t) \left[\frac{m_a}{2\pi kT(\mathbf{r}, t)} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m_a c_a^2(\mathbf{r}, t)}{2kT(\mathbf{r}, t)} \right\}.$$

Тоді можна знайти [49] в нульовому наближенні величини (3.5), котрі входять у відповідні рівняння переносу (3.4a), (3.4б), (3.4в): $\overset{\leftrightarrow}{P}' = (P^{kin} + P^{hs} + P^{MF}) \overset{\leftrightarrow}{I} \equiv P \overset{\leftrightarrow}{I}$, $\mathbf{q}^{kin} = \mathbf{q}^{hs} = 0$, $\mathbf{V}_a(\mathbf{r}, t) = 0$,

$$P^{kin} = \sum_{a=1}^M n_a kT, \quad P^{hs} = \frac{2}{3} \pi kT \sum_{a,b=1}^M n_a n_b \sigma_{ab}^3 g_2^{ab}(\sigma_{ab}),$$

$$P^{MF} = -\frac{2}{3}\pi \sum_{a,b=1}^M n_a n_b \int_{\sigma_{ab}}^{\infty} dr r^3 g_2^{ab}(r) [\Phi_{ab}^l(r)]',$$

P — гідростатичний тиск, $\overset{\leftrightarrow}{I}$ — одиничний тензор.

В першому наближенні шукатимемо функції розподілу у вигляді:

$$f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t) = f_a^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t) + f_a^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t) = f_a^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t)[1 + \phi_a]. \quad (3.6)$$

Підставмо (3.6) в (2.2). Тоді, відкидаючи члени вищого порядку малості і опускаючи доданки, що перетворюються в нуль, кінетичні рівняння (2.2) в першому наближенні запишуться так:

$$\mathcal{D}_a f_a^{(0)} = \sum_{b=1}^M \left[I_E^{(1)}(f_a^{(0)}, f_b^{(0)}) + I_{MF}(f_a^{(0)}, f_b) + J_E^{(0)}(\phi_a, \phi_b) + J_L(\phi_a, \phi_b) \right], \quad (3.7)$$

де

$$\mathcal{D}_a \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad (3.8)$$

$$J_E^{(0)}(\phi_a, \phi_b) = \int d\mathbf{v}_b d\omega v_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} g_2^{ab}(\sigma_{ab}) \times \quad (3.9)$$

$$\times [\phi_a(\mathbf{c}'_a) + \phi_b(\mathbf{c}'_b) - \phi_a(\mathbf{c}_a) - \phi_b(\mathbf{c}_b)],$$

$$J_L(\phi_a, \phi_b) = \int d\mathbf{v}_b d\omega v_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} [\phi_a(\mathbf{c}_a^*) + \phi_b(\mathbf{c}_b^*) - \phi_a(\mathbf{c}_a) - \phi_b(\mathbf{c}_b)]. \quad (3.10)$$

Далі будемо спрощувати рівняння (3.7), обчислюючи члени $\mathcal{D}_a f_a^{(0)}$, $I_E^{(1)}(f_a^{(0)}, f_b^{(0)})$ та $I_{MF}(f_a^{(0)}, f_b)$. Розкриваючи дію потокового оператора \mathcal{D}_a на $f_a^{(0)}$, похідні по часу виключаємо за допомогою рівнянь (3.4) для n_a , \mathbf{V} і T . Тоді

$$\mathcal{D}_a f_a^{(0)} = f_a^{(0)} \left\{ \left(\frac{m_a c_a^2}{2kT} - \frac{3}{2} \right) \mathbf{c}_a \cdot \nabla \ln T + \frac{m_a}{kT} \mathbf{c}_a \mathbf{c}_a : \nabla \mathbf{V} - \quad (3.11)$$

$$- \left[1 + \left(\frac{m_a c_a^2}{3kT} - 1 \right) \left(1 + \frac{2\pi}{3n} \sum_{b,c=1}^M n_b n_c \sigma_{bc}^3 g_2^{bc} \right) \right] \nabla \cdot \mathbf{V} +$$

$$+ \frac{\nabla n_a}{n_a} \cdot \mathbf{c}_a - \frac{m_a}{\rho kT} \nabla P \cdot \mathbf{c}_a \right\}.$$

g_2^{bc} — значення квазірівноважної парної функції розподілу на контакті.

Інтеграли $I_E^{(1)}(f_a^{(0)}, f_b^{(0)})$ можна обчислити прямим інтегруванням подібно до того, як це зроблено в [52] для односортового випадку:

$$\sum_{b=1}^M I_E^{(1)}(f_a^{(0)}, f_b^{(0)}) = -f_a^{(0)} \frac{2\pi}{3} \sum_{b=1}^M n_b \sigma_{ab}^3 \left\{ \nabla g_2^{ab} \cdot \mathbf{c}_a + g_2^{ab} \left[2\nabla \ln n_b \cdot \mathbf{c}_a + \quad (3.12)$$

$$+ \left(\frac{3m_a m_b}{5kT} c_a^2 + m_a - 2m_b \right) \frac{2m_a}{(m_a + m_b)^2} \nabla \ln T \cdot \mathbf{c}_a +$$

$$+ \frac{4\mu_{ab}}{5kT} \mathbf{c}_a \mathbf{c}_a : \nabla \mathbf{V} + \left(\frac{2\mu_{ab}}{5kT} c_a^2 - \frac{2m_b}{m_a + m_b} \right) \nabla \cdot \mathbf{V} \right] \right\}.$$

Для обчислення доданків $I_{MF}(f_a^{(0)}, f_b)$ (які насправді є функціоналами лише f_b) треба розкласти в ряд $n_b(\mathbf{r}_b, t)$ та $g_2^{ab}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, t)$ [53]. Інтегруючи по $d\mathbf{v}_b$ одержимо:

$$\sum_{b=1}^M I_{MF}(f_a^{(0)}, f_b) = f_a^{(0)} \frac{\mathbf{c}_a}{kT} \cdot \nabla \sum_{b=1}^M n_b \nu_{ab}(\sigma_{ab}), \quad (3.13)$$

де

$$\nu_{ab}(\sigma_{ab}) = \frac{4\pi}{3} \int_{\sigma_{ab}}^{\infty} dr_{ab} r_{ab}^3 g_2^{ab}(r_{ab}) \frac{\partial \Phi^l}{\partial r_{ab}}. \quad (3.14)$$

Зібравши у лівій частині обчислені члени, одержимо рівняння на поправки ϕ_a :

$$f_a^{(0)} \left[\mathcal{L}_a \mathbf{c}_a \cdot \nabla \ln T + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{P}}_a : \nabla \mathbf{V} + \frac{n}{n_a} \mathbf{c}_a \cdot \mathbf{d}_a \right] = \sum_{b=1}^M \left[J_E^{(0)}(\phi_a, \phi_b) + J_L(\phi_a, \phi_b) \right], \quad (3.15)$$

де використано позначення:

$$\mathcal{L}_a = \frac{m_a c_a^2}{2kT} \mathcal{L}_a^{(1)} + \mathcal{L}_a^{(2)}, \quad (3.16)$$

$$\mathcal{L}_a^{(1)} = 1 + \frac{8\pi}{5} \sum_{b=1}^M n_b \sigma_{ab}^3 g_2^{ab} \frac{m_a m_b}{(m_a + m_b)^2},$$

$$\mathcal{L}_a^{(2)} = -\frac{3}{2} - \frac{m_a n}{\rho} + \frac{2\pi}{3} \sum_{b=1}^M n_b \sigma_{ab}^3 g_2^{ab} \frac{2m_a(m_a - 2m_b)}{(m_a + m_b)^2} - \frac{2\pi m_a}{3\rho} \zeta,$$

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{P}}_a = \frac{m_a}{kT} \mathcal{P}_a^{(1)} \mathbf{c}_a \mathbf{c}_a - \left[\frac{m_a c_a^2}{3kT} \mathcal{P}_a^{(2)} + \mathcal{P}_a^{(3)} \right] \overset{\leftrightarrow}{I}, \quad (3.17)$$

$$\mathcal{P}_a^{(1)} = 1 + \frac{8\pi}{15} \gamma_a,$$

$$\mathcal{P}_a^{(2)} = 1 + \frac{2\pi}{3n} \zeta - \frac{4\pi}{5} \gamma_a,$$

$$\mathcal{P}_a^{(3)} = -\frac{2\pi}{3n} \zeta + \frac{4\pi}{3} \gamma_a,$$

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_a = & \frac{\nabla n_a}{n} - \frac{\rho_a}{\rho} \frac{\nabla n}{n} + \frac{4\pi n_a}{3n} \sum_{b=1}^M \sigma_{ab}^3 g_2^{ab} \nabla n_b - \\ & - \frac{4\pi}{3} \frac{\rho_a}{\rho n} \sum_{b,c=1}^M n_b \sigma_{bc}^3 g_2^{bc} \nabla n_c + \frac{2\pi n_a}{3n} \sum_{b=1}^M n_b \sigma_{ab}^3 \nabla g_2^{ab} - \\ & - \frac{2\pi}{3} \frac{\rho_a}{\rho n} \sum_{b,c=1}^M n_b n_c \sigma_{bc}^3 \nabla g_2^{bc} - \frac{n_a}{nkT} \left[\nabla \sum_{b=1}^M n_b \nu_{ab} + \frac{m_a}{\rho} \nabla P^{MF} \right], \end{aligned} \quad (3.18)$$

а $\zeta = \sum_{b,c=1}^M n_b n_c \sigma_{bc}^3 g_2^{bc}$, $\gamma_a = \sum_{b=1}^M n_b \sigma_{ab}^3 g_2^{ab}$, $\rho_a = m_a n_a$. Вектор \mathbf{d}_a на-

зивається дифузійною термодинамічною силою частинок сорту a .

Як і у випадку точкових частинок $\sum_{a=1}^M \mathbf{d}_a = 0$. Мусимо зазначити,

що з міркувань зручності ми прийняли означення для \mathbf{d}_a , яке при $\sigma_a \rightarrow 0$, $a = 1 \div M$ не переходить в означення для точкових частинок, дане, наприклад, в [51,52].

Поправку ϕ_a шукатимемо у вигляді:

$$\begin{aligned} \phi_a(\mathbf{c}_a) = & -\sqrt{\frac{m_a}{2kT}} A_a(c_a^2) \mathbf{c}_a \cdot \nabla \ln T - \frac{m_a}{kT} B_a(c_a^2) (\mathbf{c}_a \mathbf{c}_a - \frac{1}{3} c_a^2 \overset{\leftrightarrow}{I}) : \nabla \mathbf{V} + \\ & + n \sqrt{\frac{m_a}{2kT}} \sum_{p=1}^M E_{ap}(c_a^2) \mathbf{c}_a \cdot \mathbf{d}_p^*, \end{aligned} \quad (3.19)$$

де $\{\mathbf{d}_p^*\}_{p=1 \div M}$ — деякий набір векторів, пов'язаний з термодифузійними силами співвідношенням $\mathbf{d}_p = \mathbf{d}_p^* - \rho_p / \rho \sum_{q=1}^M \mathbf{d}_q^*$. Цей набір вводить для того, щоб обійти лінійну залежність векторів \mathbf{d}_p .

Оскільки макроскопічні змінні n_a , \mathbf{V} і T виражаються лише через $f_a^{(0)}$, то на поправки ϕ_a існують певні обмеження, які зводяться до додаткових умов на функції $A_a(c_a^2)$ і $E_{ap}(c_a^2)$:

$$\sum_{a=1}^M m_a^{3/2} \int d\mathbf{v}_a f_a^{(0)} c_a^2 A_a(c_a^2) = 0, \quad \sum_{a=1}^M m_a^{3/2} \int d\mathbf{v}_a f_a^{(0)} c_a^2 E_{ap}(c_a^2) = 0. \quad (3.20)$$

У подальших формулах буде зручніше користуватися безрозмірною швидкістю $\mathbf{C}_a \equiv \sqrt{\frac{m_a}{2kT}} \mathbf{c}_a$. Підставляючи поправку (3.19) в рівняння (3.15) і прирівнюючи вирази при $\nabla \ln T$, $\nabla \mathbf{V}$, \mathbf{d}_p^* одержимо системи рівнянь для визначення невідомих функцій A_a , B_a , E_{ap} . Система для $A_a(C_a^2)$ має вигляд:

$$\begin{aligned} f_a^{(0)} \mathcal{L}_a \mathbf{c}_a = & - \sum_{b=1}^M \int d\mathbf{v}_b d\omega v_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} \{g_2^{ab}(\sigma_{ab}) \times \\ & \times [A_a(C_a^2) \mathbf{C}'_a + A_b(C_b^2) \mathbf{C}'_b - A_a(C_a^2) \mathbf{C}_a - A_b(C_b^2) \mathbf{C}_b] + [**]\}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Позначення $[**]$ означає вираз у квадратних дужках, що стоїть перед цим позначенням, але із заміною штрихованих символів на "зірчочковані" і служить для позначення кулонівських доданків, що походять від інтеграла зіткнень $J_L(\phi_a, \phi_b)$ (3.10). Наприклад, у рівнянні (3.21) $[**]$ означає:

$$[**] \equiv [A_a(C_a^{*2}) \mathbf{C}_a^* + A_b(C_b^{*2}) \mathbf{C}_b^* - A_a(C_a^2) \mathbf{C}_a - A_b(C_b^2) \mathbf{C}_b].$$

Система рівнянь для функцій $B_a(C_a^2)$ виглядає так:

$$\begin{aligned} f_a^{(0)} \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{P}}_a = & - \sum_{b=1}^M \int d\mathbf{v}_b d\omega v_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} \{g_2^{ab}(\sigma_{ab}) \times \\ & \times [B_a(C_a^2) (\mathbf{C}'_a \mathbf{C}'_a - \frac{1}{3} C_a^2 \overset{\leftrightarrow}{I}) + B_b(C_b^2) (\mathbf{C}'_b \mathbf{C}'_b - \frac{1}{3} C_b^2 \overset{\leftrightarrow}{I}) - \\ & - B_a(C_a^2) (\mathbf{C}_a \mathbf{C}_a - \frac{1}{3} C_a^2 \overset{\leftrightarrow}{I}) - B_b(C_b^2) (\mathbf{C}_b \mathbf{C}_b - \frac{1}{3} C_b^2 \overset{\leftrightarrow}{I})] + [**]\}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Для функцій $E_{ap}(C_a^2)$ будемо мати:

$$\begin{aligned} f_a^{(0)} \frac{\delta_{ap} - \rho_a / \rho}{n} \mathbf{c}_a = & \sum_{b=1}^M \int d\mathbf{v}_b d\omega v_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} \{g_2^{ab}(\sigma_{ab}) \times \\ & \times [E_{ap}(C_a^2) \mathbf{C}'_a + E_{bp}(C_b^2) \mathbf{C}'_b - E_{ap}(C_a^2) \mathbf{C}_a - E_{bp}(C_b^2) \mathbf{C}_b] + [**]\}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

де δ_{ap} — символ Кронекера.

При кожному фіксованому $p \in M$ рівнянь типу (3.23), що утворюють замкнену систему. Розв'язуючи кожен з таких систем з додатковими умовами (3.20), ми знайдемо M^2 функцій $E_{ap}(C^2)$. Але ці функції визначаються неоднозначно [52]. Якщо (3.23) домножити на ρ_p/ρ і просумувати по індексу p , то одержимо:

$$\sum_{b=1}^M \int dv_b d\omega v_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} \{g_2^{ab}(\sigma_{ab})[\mathcal{E}'_a + \mathcal{E}'_b - \mathcal{E}_a - \mathcal{E}_b] + [**]\} = 0, \quad (3.24)$$

де

$$\mathcal{E}_a = \sum_{q=1}^M \frac{\rho_q}{\rho} E_{aq}(C_a^2) \mathbf{C}_a.$$

Рівняння (3.24) означає, що функції $E_{ap}(C_a^2)$ є такими, що їх лінійна комбінація \mathcal{E}_a — адитивний інваріант. Для спрощення цей адитивний інваріант покладають рівним нулю:

$$\sum_{q=1}^M \frac{\rho_q}{\rho} E_{aq}(C_a^2) \mathbf{C}_a = 0.$$

Завдяки такому кроку, вектор \mathbf{d}_p^* в (3.19) можна замінити на $\mathbf{d}_p^* - \frac{\rho_p}{\rho} \sum_{q=1}^M \mathbf{d}_q^*$. Тоді поправка ϕ_a знову запишеться через вектори \mathbf{d}_p :

$$\begin{aligned} \phi_a(\mathbf{C}_a) = & -A_a(C_a^2) \mathbf{C}_a \cdot \nabla \ln T - B_a(C_a^2) (\mathbf{C}_a \mathbf{C}_a - \frac{1}{3} C_a^2 \overset{\leftrightarrow}{I}) : \nabla \mathbf{V} + \quad (3.25) \\ & + n \sum_{p=1}^M E_{ap}(C_a^2) \mathbf{C}_a \cdot \mathbf{d}_p. \end{aligned}$$

Функції $A_a(C_a^2)$ і $E_{ap}(C_a^2)$ шукатимемо у вигляді розкладів по поліномах Соніна-Лягера з індексом $3/2$, а $B_a(C_a^2)$ — з індексом $5/2$:

$$A_a(C_a^2) = \sum_{j=0}^{\infty} A_a(j) L_j^{3/2}(C_a^2), \quad E_{ap}(C_a^2) = \sum_{j=0}^{\infty} E_{ap}(j) L_j^{3/2}(C_a^2), \quad (3.26)$$

$$B_a(C_a^2) = \sum_{j=0}^{\infty} B_a(j) L_j^{5/2}(C_a^2).$$

Ці поліноми означаються так [51]

$$L_j^\nu(x) = \sum_{m=0}^j (-x)^m \frac{j! \Gamma(j + \nu + 1)}{m! \Gamma(m + \nu + 1) \Gamma(j - m + 1)} \quad (3.27)$$

і задовольняють умову нормування:

$$\int_0^\infty dx e^{-x} x^\nu L_j^\nu(x) L_{j'}^\nu(x) = \delta_{jj'} j! \Gamma(j + \nu + 1).$$

Далі треба шукати коефіцієнти розкладу $A_a(j)$, $B_a(j)$, $E_{ap}(j)$. Коли розклад (3.26) для $A_a(C_a^2)$ підставити у (3.21) і, домноживши скалярно кожне рівняння на $\sqrt{\frac{m_a}{2kT}} \mathbf{C}_a L_s^{3/2}(C_a^2)$, проінтегрувати по $d\mathbf{v}_a$, то одержимо систему:

$$\frac{3}{2} n_a \left[\frac{5}{2} \mathcal{L}_a^{(1)}(\delta_{s0} - \delta_{s1}) + \mathcal{L}_a^{(2)} \delta_{s0} \right] = - \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{b=1}^M \{ \alpha_{sj}^{ab,a} A_a(j) + \alpha_{sj}^{ab,b} A_b(j) \}, \quad (3.28)$$

де

$$\begin{aligned} \alpha_{sj}^{ab,a} = & \int d\mathbf{v}_a d\mathbf{v}_b d\omega v_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} \sqrt{\frac{m_a}{2kT}} L_s^{3/2}(C_a^2) \{g_2^{ab}(\sigma_{ab}) \times \quad (3.29) \\ & \times [L_j^{3/2}(C_a^2) \mathbf{C}'_a - L_j^{3/2}(C_a^2) \mathbf{C}_a] + [**]\} \cdot \mathbf{C}_a, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_{sj}^{ab,b} = & \int d\mathbf{v}_a d\mathbf{v}_b d\omega v_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} \sqrt{\frac{m_a}{2kT}} L_s^{3/2}(C_a^2) \{g_2^{ab}(\sigma_{ab}) \times \quad (3.30) \\ & \times [L_j^{3/2}(C_b^2) \mathbf{C}'_b - L_j^{3/2}(C_b^2) \mathbf{C}_b] + [**]\} \cdot \mathbf{C}_a. \end{aligned}$$

Аналогічно шукається система рівнянь для коефіцієнтів $B_a(j)$. Підставляючи розклад (3.26) функцій $B_a(C_a^2)$ у систему рівнянь (3.22), домножуючи скалярно на тензор $L_s^{5/2}(C_a^2) \mathbf{C}_a \mathbf{C}_a$ й інтегруючи по $d\mathbf{v}_a$, отримаємо:

$$\frac{1}{2} n_a [5(3\mathcal{P}_a^{(1)} - \mathcal{P}_a^{(2)}) \delta_{s0} - 3\mathcal{P}_a^{(3)}] = - \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{b=1}^M \{ \beta_{sj}^{ab,a} B_a(j) + \beta_{sj}^{ab,b} B_b(j) \}, \quad (3.31)$$

де

$$\beta_{sj}^{ab,a} = \int d\mathbf{v}_a d\mathbf{v}_b d\omega v_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} L_s^{5/2}(C_a^2) \{g_2^{ab}(\sigma_{ab}) \times \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} & \times [L_j^{5/2}(C_a'^2)(C_a' C_a' - \frac{1}{3} C_a'^2 \overleftrightarrow{I}) - L_j^{5/2}(C_a^2)(C_a C_a - \frac{1}{3} C_a^2 \overleftrightarrow{I}) + [**]] : C_a C_a, \\ & \beta_{s_j}^{ab,b} = \int dv_a dv_b d\omega v_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} L_s^{5/2}(C_a^2) \left\{ g_2^{ab}(\sigma_{ab}) \times \right. \\ & \left. \times [L_j^{5/2}(C_b'^2)(C_b' C_b' - \frac{1}{3} C_b'^2 \overleftrightarrow{I}) - L_j^{5/2}(C_b^2)(C_b C_b - \frac{1}{3} C_b^2 \overleftrightarrow{I}) + [**]] : C_a C_a. \right. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Як можна бачити, для фіксованого p , система рівнянь (3.23) для $E_{ap}(C_a^2)$ відрізняється від системи рівнянь (3.21) для $A_a(C_a^2)$ лише лівою частиною. Тому, ми можемо записати систему рівнянь для коефіцієнтів розкладу функції $E_{ap}(C_a^2)$ по аналогії з (3.28), обчислюючи лише ліву частину:

$$\frac{3}{2} \left(\delta_{ap} - \frac{\rho_a}{\rho} \right) \delta_{s0} = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{b=1}^M \{ \alpha_{s_j}^{ab,a} E_{ap}(j) + \alpha_{s_j}^{ab,b} E_{bp}(j) \}. \quad (3.34)$$

При цьому $p = 1 \div M$, даючи M систем.

Зауважмо, що системи рівнянь (3.28) і (3.34) не є лінійно незалежними. Тому кожному з них треба доповнити ще одним незалежним рівнянням. Вони одержуються з додаткових умов (3.20), які набирають вигляду:

$$\sum_{a=1}^M \sqrt{m_a} n_a A_a(0) = 0, \quad \sum_{a=1}^M \sqrt{m_a} n_a E_{ap}(0) = 0, \quad p = 1 \div M.$$

Співвідношення (3.28), (3.31) та (3.34) утворюють нескінченні (по j) системи лінійних рівнянь, які обривають при деякому j в реальних розрахунках.

Шукатимемо функції $A_a(C_a^2)$ та $E_{ap}(C_a^2)$ в наближенні двох поліномів, а $B_a(C_a^2)$ — в наближенні одного полінома. Тому нам потрібні величини (3.29), (3.30) тільки з індексами $s, j = 0; 1$, а (3.32), (3.33) — лише з індексами $s, j = 0$. Ці величини є розраховані [51,52] і зводяться до Ω -інтегралів, котрі залежать від конкретного вигляду потенціала взаємодії. Ми його розділили на тверді кульки і кулонівський потенціал, отже, буде два типи Ω -інтегралів: Ω^{hs} та Ω^l .

$$\Omega_{ab}^{hs,l(p,q)} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu_{ab}}} \int_0^{\infty} dx e^{-x^2} x^{2q+3} Q_{ab}^{hs,l(p)}, \quad (3.35)$$

де

$$Q_{ab}^{hs(p)} = 2\pi \int_0^{\sigma_{ab}} db b [1 - \cos^p \chi'_{ab}(b, v_{ab})],$$

$$Q_{ab}^{l(p)} = 2\pi \int_{\sigma_{ab}}^{\infty} db b [1 - \cos^p \chi^*_{ab}(b, v_{ab})],$$

b — прицільний параметр, а χ'_{ab} та χ^*_{ab} — кути розсіяння однієї на одній твердих кульок та кулонівських частинок, відповідно.

Ω^{hs} -інтеграли шукаються точно, оскільки кут розсіяння χ'_{ab} можна знайти з геометричних міркувань:

$$\cos \frac{\chi'_{ab}}{2} = \frac{b}{\sigma_{ab}}.$$

Тоді для Ω^{hs} -інтегралів з потрібними p і q матимемо:

$$\Omega_{ab}^{hs(1,1)} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu_{ab}}} \pi \sigma_{ab}^2,$$

$$\Omega_{ab}^{hs(1,2)} = 3\Omega_{ab}^{hs(1,1)}, \quad \Omega_{ab}^{hs(1,3)} = 12\Omega_{ab}^{hs(1,1)}, \quad \Omega_{ab}^{hs(2,2)} = 2\Omega_{ab}^{hs(1,1)}.$$

Кулонівські Ω^l -інтеграли будемо шукати, припускаючи, що кути розсіяння χ^*_{ab} є малі. Тоді, подібно до [53]

$$\cos \chi^*_{ab} = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{2z_a z_b e^2}{\varepsilon \mu_{ab} v_{ab}^2 b} \right)^2.$$

Використовуючи цю формулу одержимо логарифмічну розбіжність $Q_{ab}^{l(p)}$ на великих прицільних параметрах b . Щоб її уникнути будемо обрізати інтегрування по b деяким ефективним радіусом D , що має зміст радіуса екранування. Тоді

$$\Omega_{ab}^{l(1,1)} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu_{ab}}} \frac{\pi}{2} \left(\frac{z_a z_b e^2}{\varepsilon kT} \right)^2 \ln \frac{D}{\sigma_{ab}},$$

$$\Omega_{ab}^{l(1,2)} = \Omega_{ab}^{l(1,1)}, \quad \Omega_{ab}^{l(1,3)} = 2\Omega_{ab}^{l(1,1)}, \quad \Omega_{ab}^{l(2,2)} = 2\Omega_{ab}^{l(1,1)}.$$

Обчисливши Ω -інтеграли, ми тим самим визначили всі величини, необхідні для відшукування функцій A_a , B_a , E_{ap} .

4. Коефіцієнти переносу

Тепер, окресливши як визначити поправки ϕ_a , можна обчислити в першому наближенні тензор напружень $\overleftrightarrow{P}^{(1)}$, вектор теплового

потокі $\mathbf{q}^{(1)}$ і дифузійні швидкості $\mathbf{V}_a^{(1)}$ (або дифузійні потоки $\mathbf{j}_a^{(1)}$) кожного сорту частинок. Виходитимемо з виразів для $\overleftrightarrow{P}^{(1)}$ і $\mathbf{q}^{(1)}$, для яких вже зроблено розклад по нелокальності [49,53]:

$$\overleftrightarrow{P}^{(1)} = \overleftrightarrow{P}^{kin(1)} + \overleftrightarrow{P}^{hs(1)}, \quad \mathbf{q}^{(1)} = \mathbf{q}^{kin(1)} + \mathbf{q}^{hs(1)}, \quad (4.1)$$

$$\overleftrightarrow{P}^{kin(1)} = \sum_{a=1}^M \int d\mathbf{v}_a f_a^{(1)} m_a \mathbf{c}_a \mathbf{c}_a, \quad \mathbf{q}^{kin(1)} = \sum_{a=1}^M \int d\mathbf{v}_a f_a^{(1)} \frac{m_a}{2} c_a^2 \mathbf{c}_a, \quad (4.2)$$

$$\overleftrightarrow{P}^{hs(1)} = \overleftrightarrow{P}_{(0)}^{hs(1)} + \overleftrightarrow{P}_{(1)}^{hs(1)} = \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^3 g_2^{ab} \int d\mathbf{v}_a d\mathbf{v}_b d^2 k_{ab} \theta(\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}) (\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}) m_a (\mathbf{v}'_a - \mathbf{v}_a) \mathbf{k}_{ab} \times \\ &\times \left(f_a^{(1)} f_b^{(0)} + f_a^{(0)} f_b^{(1)} \right) + \frac{1}{4} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^4 g_2^{ab} \int d\mathbf{v}_a d\mathbf{v}_b d^2 k_{ab} \theta(\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}) \times \\ &\times (\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}) m_a (\mathbf{v}'_a - \mathbf{v}_a) \mathbf{k}_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} \left(\mathbf{k}_{ab} \cdot \nabla \ln \frac{f_a^{(0)}}{f_b^{(0)}} \right). \end{aligned}$$

Верхній індекс біля \overleftrightarrow{P} , \mathbf{q} та \mathbf{V}_a вказує на перше наближення для функції розподілу, а нижні індекси (0) та (1) нумерують вклади нульового та першого членів розкладу функції розподілу в ряд по нелокальності.

$$\mathbf{q}^{hs(1)} = \mathbf{q}_{(0)}^{hs(1)} + \mathbf{q}_{(1)}^{hs(1)} = \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^3 g_2^{ab} \int d\mathbf{v}_a d\mathbf{v}_b d^2 k_{ab} \theta(\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}) (\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}) \frac{m_a}{2} (c_a'^2 - c_a^2) \mathbf{k}_{ab} \times \\ &\times \left(f_a^{(1)} f_b^{(0)} + f_a^{(0)} f_b^{(1)} \right) + \frac{1}{4} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^4 g_2^{ab} \int d\mathbf{v}_a d\mathbf{v}_b d^2 k_{ab} \theta(\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}) \times \\ &\times (\mathbf{k}_{ab} \cdot \mathbf{v}_{ab}) \frac{m_a}{2} (c_a'^2 - c_a^2) \mathbf{k}_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} \left(\mathbf{k}_{ab} \cdot \nabla \ln \frac{f_a^{(0)}}{f_b^{(0)}} \right). \end{aligned}$$

Вклади $\mathbf{q}_{(0)}^{hs(1)}$ та $\mathbf{q}_{(1)}^{hs(1)}$ мають точно таку саму структуру, що й $\overleftrightarrow{P}_{(0)}^{hs(1)}$ та $\overleftrightarrow{P}_{(1)}^{hs(1)}$ відповідно, тільки під інтегралами в них замість $m_a (\mathbf{v}'_a - \mathbf{v}_a)$ стоїть $m_a (c_a'^2 - c_a^2)/2$.

Дифузійна швидкість сорту a

$$\mathbf{V}_a^{(1)} = \frac{1}{n_a} \int d\mathbf{v}_a f_a^{(1)} \mathbf{c}_a. \quad (4.5)$$

Вклади до $\overleftrightarrow{P}^{(1)}$ та $\mathbf{q}^{(1)}$ можна обчислити подібно до того, як це зроблено у [52], інтегруючи спочатку по орієнтації вектора \mathbf{k}_{ab} , а потім по швидкостях $d\mathbf{v}_a$, $d\mathbf{v}_b$. Проводячи таке інтегрування, одержимо:

$$\overleftrightarrow{P}^{kin(1)} = -kT \sum_{a=1}^M n_a B_a(0) \overleftrightarrow{S},$$

де $\overleftrightarrow{S} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{V} + (\nabla \mathbf{V})^T] - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{V}) \overleftrightarrow{I}$ — тензор швидкостей зсуву.

$$\overleftrightarrow{P}_{(0)}^{hs(1)} = -\frac{8}{15} \pi kT \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^3 g_2^{ab} n_a n_b \frac{m_a}{m_a + m_b} B_b(0) \overleftrightarrow{S},$$

$$\overleftrightarrow{P}_{(1)}^{hs(1)} = -\frac{4}{9} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^4 g_2^{ab} n_a n_b \sqrt{2\pi\mu_{ab}kT} \left(\frac{6}{5} \overleftrightarrow{S} + (\nabla \cdot \mathbf{V}) \overleftrightarrow{I} \right),$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^{kin(1)} &= \frac{5}{4} \sqrt{2k^3T} \sum_{a=1}^M \frac{n_a}{\sqrt{m_a}} \left([A_a(1) - A_a(0)] \nabla T - \right. \\ &\left. - nT \sum_{p=1}^M [E_{ap}(1) - E_{ap}(0)] \mathbf{d}_p \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{(0)}^{hs(1)} &= \frac{2\pi}{3} \sqrt{2k^3T} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^3 g_2^{ab} \frac{n_a n_b}{m_a + m_b} \left(\left[\frac{3\mu_{ab}}{\sqrt{m_b}} A_b(1) - \sqrt{m_b} A_b(0) \right] \nabla T - \right. \\ &\left. - nT \sum_{p=1}^M \left[\frac{3\mu_{ab}}{\sqrt{m_b}} E_{bp}(1) - \sqrt{m_b} E_{bp}(0) \right] \mathbf{d}_p \right), \end{aligned}$$

$$\mathbf{q}_{(1)}^{hs(1)} = -\frac{4}{3} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^4 g_2^{ab} n_a n_b \frac{\sqrt{2\pi\mu_{ab}k^3T}}{m_a + m_b} \nabla T \equiv -\sum_{a,b=1}^M \frac{3k}{m_a + m_b} \kappa_{ab} \nabla T.$$

Коефіцієнти об'ємної та зсувної в'язкості κ та η означаються зі співвідношення для повного тензора напружень, яке (коли додати всі вклади) набирає вигляду:

$$\overleftrightarrow{P} = \overleftrightarrow{P}^{(0)} + \overleftrightarrow{P}^{(1)} = P \overleftrightarrow{I} - \kappa (\nabla \cdot \mathbf{V}) \overleftrightarrow{I} - 2\eta \overleftrightarrow{S}, \quad (4.6)$$

звідки

$$\kappa = \frac{4}{9} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^4 g_2^{ab} n_a n_b \sqrt{2\pi\mu_{ab}kT} = \sum_{a,b=1}^M \kappa_{ab},$$

$$\eta = \frac{3}{5}\kappa + \left(\frac{1}{2} \sum_{a=1}^M n_a B_a(0) + \frac{4\pi}{15} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^3 g_2^{ab} n_a n_b \frac{m_a}{m_a + m_b} B_b(0) \right) kT.$$

Додавши усі вклади теплового потоку й записавши його у вигляді

$$\mathbf{q} = -\lambda' \nabla T + \sum_{p=1}^M \omega_p \mathbf{d}_p, \quad (4.7)$$

отримуємо парціальний коефіцієнт теплопровідності λ' та коефіцієнти пропорційності теплового потоку до термодифузійних сил ω_p :

$$\lambda' = \sum_{a,b=1}^M \frac{3k}{m_a + m_b} \kappa_{ab} - \sqrt{2k^3 T} \left(\frac{5}{4} \sum_{a=1}^M \frac{n_a}{\sqrt{m_a}} [A_a(1) - A_a(0)] + \frac{2\pi}{3} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^3 g_2^{ab} \frac{n_a n_b}{m_a + m_b} \left[\frac{3\mu_{ab}}{\sqrt{m_b}} A_b(1) - \sqrt{m_b} A_b(0) \right] \right),$$

$$\omega_p = -n \sqrt{2k^3 T^3} \left(\frac{5}{4} \sum_{a=1}^M \frac{n_a}{\sqrt{m_a}} [E_{ap}(1) - E_{ap}(0)] + \frac{2\pi}{3} \sum_{a,b=1}^M \sigma_{ab}^3 g_2^{ab} \frac{n_a n_b}{m_a + m_b} \left[\frac{3\mu_{ab}}{\sqrt{m_b}} E_{bp}(1) - \sqrt{m_b} E_{bp}(0) \right] \right).$$

Підставляючи поправку (3.25) у вираз для дифузійної швидкості (4.5) і проводячи інтегрування, матимемо:

$$\mathbf{V}_a^{(1)} = -D_a^T \nabla \ln T - \sum_{p=1}^M D_{ap} \mathbf{d}_p, \quad (4.8)$$

де D_a^T — коефіцієнт термодифузії частинок сорту a , а D_{ap} — коефіцієнти взаємної дифузії. Для них можна одержати:

$$D_a^T = \sqrt{\frac{kT}{2m_a}} A_a(0), \quad D_{ap} = -n \sqrt{\frac{kT}{2m_a}} E_{ap}(0).$$

Такі означення коефіцієнтів дифузії та термодифузії (4.8) мають ту перевагу, що вони задовольняють симетрійні співвідношення Онсагера [52].

Можна прийняти й інше означення. Зокрема, для двосортної суміші, внаслідок умови на термодифузійні сили $\sum_{a=1}^M \mathbf{d}_a = 0$, не виникає потреби вводити набір векторів $\{\mathbf{d}_p^*\}_{p=1 \div M}$, оскільки $\mathbf{d}_1 = -\mathbf{d}_2$. В такому разі вирази спрощуються і зручно ввести інші означення коефіцієнтів дифузії та термодифузії (виходячи з виразу для дифузійного потоку), які безпосередньо відповідають спостережуваним на експерименті [51]:

$$\mathbf{j}_a^{(1)} = -D_a^T \nabla \ln T - \frac{n^2 m_a m_b}{\rho} D_{ab} \mathbf{d},$$

де $\mathbf{d} = \mathbf{d}_1$. При такому означенні $D_2^T = -D_1^T$, $D_{21} = -D_{12}$. Саме ці величини для двосортних сумішей представлено нижче на графіках.

5. Чисельний розрахунок коефіцієнтів переносу для різних сумішей

На основі отриманих виразів зроблено чисельні розрахунки коефіцієнтів переносу для сумішей нейтральних та заряджених частинок в залежності від температури T та процентного вмісту x (по концентрації). Для деяких систем проводиться порівняння з наявними експериментальними даними.

У вирази, що використовуються при розрахунках, входять ще значення парної функції розподілу твердих кульок різних сортів на контакті $g_2^{ab}(\sigma_{ab})$ і радіус екранування D . Щоб їх обчислити, використовувались ті самі вирази, що й у роботах [42,53]. Величина $D = 1/2\Gamma$ шукалася з рівняння, запропонованого в [56]:

$$4\Gamma^2 = \frac{4\pi e^2}{kT} \sum_{a=1}^M n_a X_a^2, \quad X_a = \left[z_a - \frac{\pi \sigma_a^2}{2(1-\Delta)} P_M \right] (1 + \Gamma \sigma_a)^{-1},$$

$$P_M = \sum_{a=1}^M \frac{n_a \sigma_a z_a}{1 + \Gamma \sigma_a} \left[1 + \frac{\pi}{2(1-\Delta)} \sum_{a=1}^M \frac{n_a \sigma_a^3}{1 + \Gamma \sigma_a} \right]^{-1}, \quad \Delta = \frac{\pi}{6} \sum_{a=1}^M n_a \sigma_a^3.$$

Для контактного значення парної функції розподілу використовувалися вирази з роботи [57]:

$$g_2^{aa}(\sigma_a) = \frac{1 - \Delta + \frac{\pi}{4} \sigma_a \sum_{b=1}^M n_b \sigma_b^2}{(1 - \Delta)^2}, \quad g_2^{ab}(\sigma_{ab}) = \frac{\sigma_b g_2^{aa}(\sigma_a) + \sigma_a g_2^{bb}(\sigma_b)}{2\sigma_{ab}}.$$

В розрахунках значення діаметрів частинок взято такими:

$$\sigma_{\text{H}_2} = 2.9 \text{ \AA}, \sigma_{\text{He}} = 2.15 \text{ \AA}, \sigma_{\text{Ar}} = 3.405 \text{ \AA}, \sigma_{\text{Kr}} = 3.67 \text{ \AA}, \sigma_{\text{Xe}} = 3.924 \text{ \AA}.$$

Розглядалися двосортні та трисортні суміші: He,Ar; H₂,Ar; Ar,Kr,Xe; He,Ar⁺; Ar⁺,Kr; Ar⁺,Kr⁺; He,Ar⁺,Kr; Ar⁺,Kr,Xe; He,Ar⁺,Kr⁺; Ar⁺,Kr⁺,Xe. Графіки розміщено в такому порядку: нейтральні суміші, двосортні суміші заряджених і незаряджених частинок, трисортні суміші заряджених і незаряджених частинок.

1) Першою розглянуто суміш He,Ar з різним процентним вмістом компонент. У таблиці 1 порівнюються експериментальні [54] та розраховані на основі моделі твердих кульок значення коефіцієнта зсувної в'язкості η . При вищих температурах розходження з експериментом менші.

Табл. 1. Експериментальні [54] та розраховані на основі моделі твердих кульок значення коефіцієнта зсувної в'язкості η для сумішей He,Ar з різним процентним вмістом компонент (перша колонка) для п'ятих різних значень температури при тиску $P = 442.3$ бар. Δ — параметр упаковки.

	$T, \text{ K}$	298.16	323.16	373.16	423.16	473.16
0.763 Ar ,	Δ	0.114	0.108	0.0979	0.0895	0.0824
0.237 He	$\eta_{\text{exp}}, 10^{-5} \text{ Pa s}$	3.743	3.735	3.684	3.791	$\frac{3.854}{3.884}$
	$\eta_{\text{cal}}, 10^{-5} \text{ Pa s}$	3.276	3.329	3.442	3.560	3.679
0.519 Ar ,	Δ	0.0968	0.0914	0.0821	0.0747	0.0684
0.481 He	$\eta_{\text{exp}}, 10^{-5} \text{ Pa s}$	2.956	$\frac{3.027}{3.019}$	3.136	3.334	—
	$\eta_{\text{cal}}, 10^{-5} \text{ Pa s}$	2.968	3.035	3.170	3.306	3.440
0.267 Ar ,	Δ	0.075	0.070	0.0628	0.0567	0.0517
0.733 He	$\eta_{\text{exp}}, 10^{-5} \text{ Pa s}$	$\frac{2.573}{2.585}$	2.662	$\frac{2.875}{2.895}$	3.080	3.259
	$\eta_{\text{cal}}, 10^{-5} \text{ Pa s}$	2.616	2.693	2.845	2.993	3.135

2) На рис.1 наведено температурну залежність коефіцієнта в'язкості суміші 0.6Ar,0.4H₂ при тисках $P = 300, 400, 500$ атмосфер. Криві розташовуються у порядку зростання тиску. Хоч така суміш не зовсім підходить під модель твердих кульок, оскільки молекула

водню не є сферичною, тим не менше одержані результати дають інформацію про успішність застосування моделі до несферичних молекул. Незвичним є те, що з підвищенням температури збіг з експериментом [55] погіршується, бо при високих температурах роль притягувальної частини міжчастинкового потенціала слабше, порівняно з відштовхувальною. Однак таку поведінку можна пояснити тим, що в наших розрахунках діаметри твердих кульок для молекул Ar і H₂ бралися фіксованими, незалежними від температури та концентрації, в той час як відомо, що цей параметр залежить від T і n .

3) На рис.1,2 подано температурні залежності коефіцієнтів об'ємної та зсувної в'язкості і теплопровідності нейтральної трисортної суміші Ar,Kr,Xe при постійному значенні параметра упаковки $\Delta = 0.12$ для різних складів суміші: концентрації компонент взято у відношеннях 1:1:1, 2:2:1, 1:2:2, відповідно. Коефіцієнти переносу по різному поведуться в залежності від співвідношення концентрацій легшої та меншої за розміром (Ar) і важчої та більшої за розміром (Xe) компонент. Коефіцієнти в'язкості зростають зі збільшенням вмісту ксенону, а коефіцієнт теплопровідності — навпаки.

Також розглядалися суміші заряджених і нейтральних частинок. При розрахунках коефіцієнтів переносу для таких систем через Ω -інтеграл враховувалась поляризаційна взаємодія заряджених та незаряджених компонент.

4) На рис.3 представлено температурні залежності коефіцієнтів $\eta(T)$, $\lambda(T)$, $D_{ab}(T)$, $D^T(T)$ для модельної суміші 0.267Ar⁺,0.733He при фіксованій загальній концентрації $n = 1.0487 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ ($\Delta = 0.00976$).

5) У суміші Ar⁺,Kr (рис.4,5), на відміну від попередньої, нейтральна компонента є важчою. Коефіцієнти переносу розраховувались для трьох фіксованих значень процентного вмісту зарядженої компоненти $x_{\text{Ar}^+} = 0.2, 0.4, 0.6$ ($x_{\text{Ar}^+} = n_{\text{Ar}^+} / (n_{\text{Ar}^+} + n_{\text{Kr}})$) при фіксованому значенні параметра упаковки $\Delta = 0.01$. Для вибраних значень вмісту Ar⁺ лише коефіцієнт термодифузії виявляє зворотню залежність від x_{Ar^+} .

6) Для суміші Ar⁺,Kr⁺ попарно представлено залежності від температури та від співвідношення концентрацій важкої і легкої компонент (рис.6–10) при фіксованій загальній концентрації $n = 2 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$. Зокрема, непропорційну поведінку D^T можна помітити і на графіках температурної залежності: найвище розташовується крива, що відповідає проміжному значенню співвідношення концентрацій. Порівнюючи температурні залежності з графіками для

суміші Ar^+, Kr , бачимо, що йонізація ще й другої компоненти — криптону — міняє характер поведінки η , λ , D^T . Криві стають вгнутими.

7) На рис.11–13 подано коефіцієнти переносу трисортних сумішей заряджених і незаряджених частинок. Тут є одна заряджена і дві нейтральні компоненти. Загальна концентрація і концентрація зарядженої компоненти фіксовані. Досліджувалась поведінка коефіцієнтів переносу при трьох різних значеннях температури в залежності від співвідношення концентрацій нейтральних компонент. Представлено дві системи: $\text{He}, \text{Ar}^+, \text{Kr}$ ($x_{\text{Ar}^+} = 0.2$, $n = 2 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$) і $\text{Ar}^+, \text{Kr}, \text{Xe}$ ($x_{\text{Ar}^+} = 0.25$, $n = 1.12 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$). З наведених графіків можна бачити як залежать коефіцієнти переносу від співвідношення між параметрами (маса і діаметр) нейтральних компонент — гелію і криптону та криптону і ксенону. Співвідношення між концентраціями нейтральних частинок позначено через y так, що $y_{\text{Kr}} = n_{\text{Kr}} / (n_{\text{Kr}} + n_{\text{He}})$ — для першої суміші, $y_{\text{Xe}} = n_{\text{Xe}} / (n_{\text{Kr}} + n_{\text{Xe}})$ — для другої суміші.

8) Останньою (рис.14–16) розглянуто систему з двома йонізованими компонентами і однією нейтральною (можна сказати, що нейтральна відіграє роль "тла"). Тепер фіксованими є загальна концентрація і концентрація нейтральної компоненти. Знову представлено дві суміші: $\text{He}, \text{Ar}^+, \text{Kr}^+$ ($x_{\text{He}} = 0.6$, $n = 1.25 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$) та $\text{Ar}^+, \text{Kr}^+, \text{Xe}$ ($x_{\text{Xe}} = 0.7$, $n = 10^{27} \text{ м}^{-3}$). В першій суміші нейтральна компонента є найлегшою, а в другій — найважчою (легке і важке "тло"). Порівнюючи графіки залежностей, зокрема, добре видно різний вплив легкої та важкої нейтральних компонент на коефіцієнти теплопровідності цих двох систем.

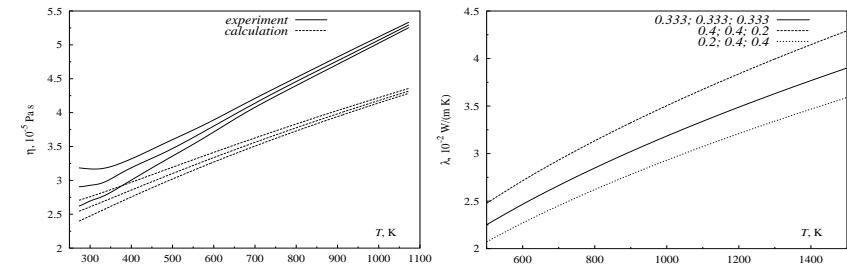


Рис. 1. Експериментальна і теоретична залежності коефіцієнта в'язкості суміші H_2, Ar від T (зліва). Коефіцієнт $\lambda(T)$ суміші $\text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}$ (справа).

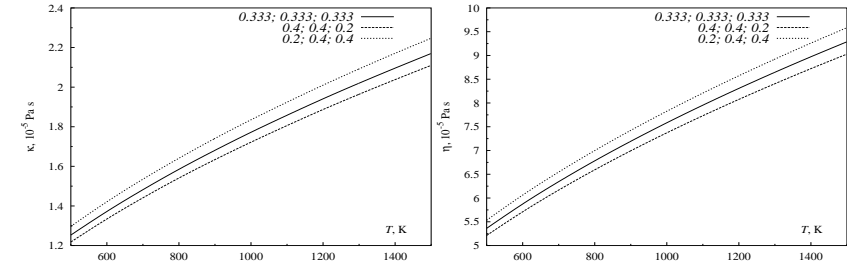


Рис. 2. Суміш $\text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}$. Температурні залежності коефіцієнтів об'ємної та зсувної в'язкості при фіксованому параметрі упаковки $\Delta = 0.12$ і різних співвідношеннях концентрацій.

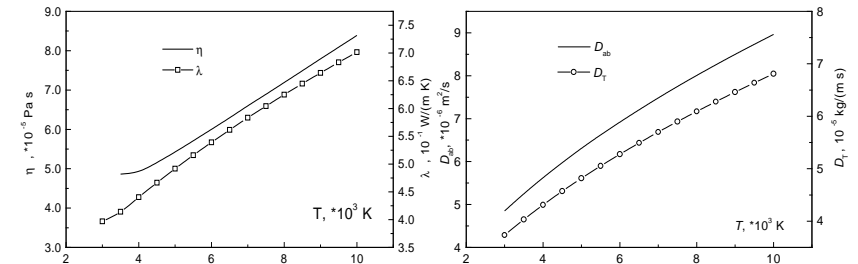


Рис. 3. Температурні залежності коефіцієнтів зсувної в'язкості та теплопровідності і дифузії та термодифузії для системи 26.7% Ar^+ , 73.3% He при $n = 1.0487 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$ $\Delta = 0.00976$.

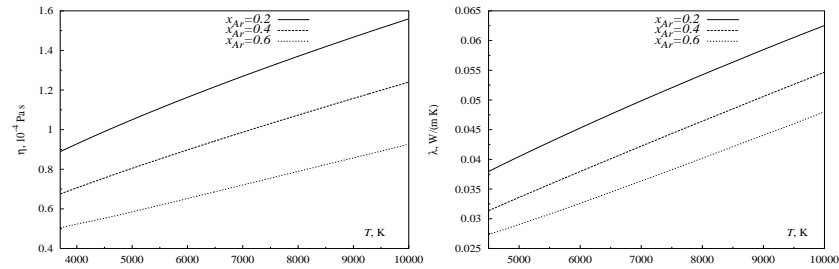


Рис. 4. Температурні залежності коефіцієнтів зсувної в'язкості та теплопровідності для системи Ag^+, Kr^+ при $\Delta = 0.01$.

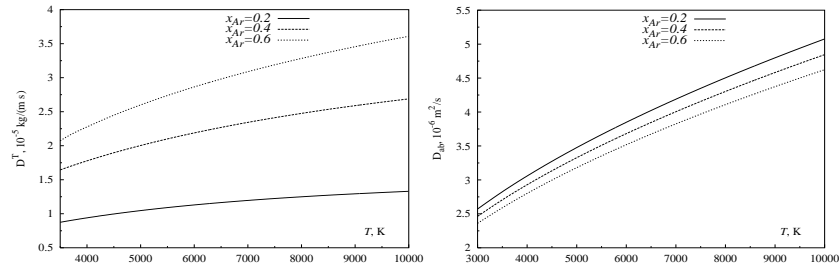


Рис. 5. Залежності коефіцієнтів термодифузії та взаємної дифузії від температури для системи Ag^+, Kr^+ при $\Delta = 0.01$.

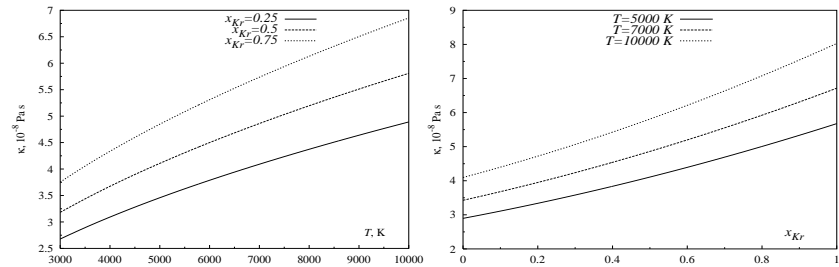


Рис. 6. Залежність від температури та співвідношення концентрацій коефіцієнта об'ємної в'язкості суміші Ag^+, Kr^+ .

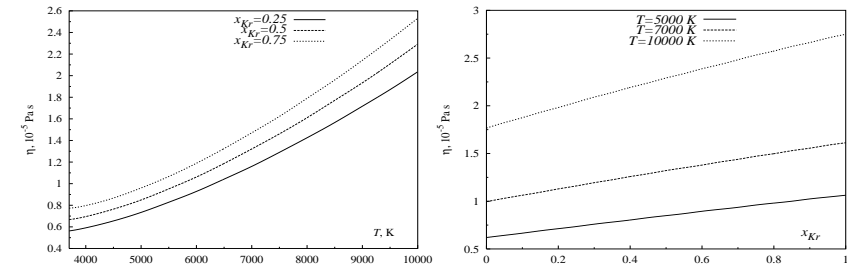


Рис. 7. Залежність від температури та співвідношення концентрацій коефіцієнта зсувної в'язкості суміші Ag^+, Kr^+ .

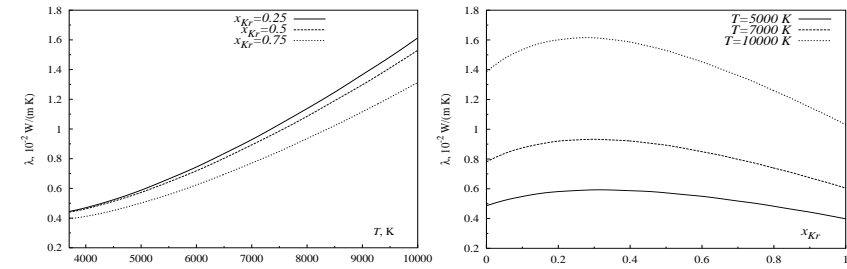


Рис. 8. Залежність від температури та співвідношення концентрацій коефіцієнта теплопровідності суміші Ag^+, Kr^+ .

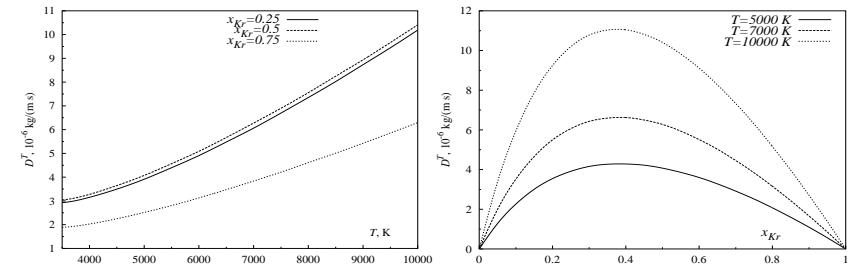


Рис. 9. Залежність від температури та співвідношення концентрацій коефіцієнта термодифузії суміші Ag^+, Kr^+ .

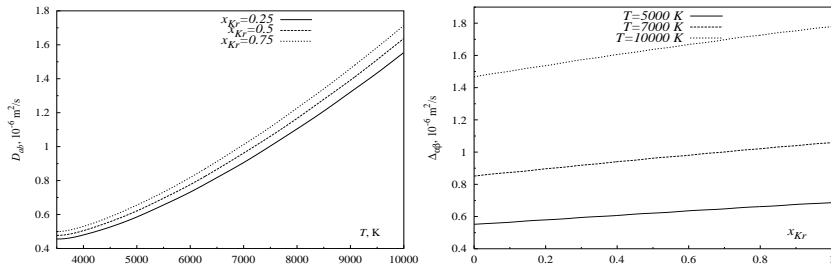


Рис. 10. Залежність від температури та співвідношення концентрацій коефіцієнта взаємної дифузії суміші Ar^+, Kr^+ .

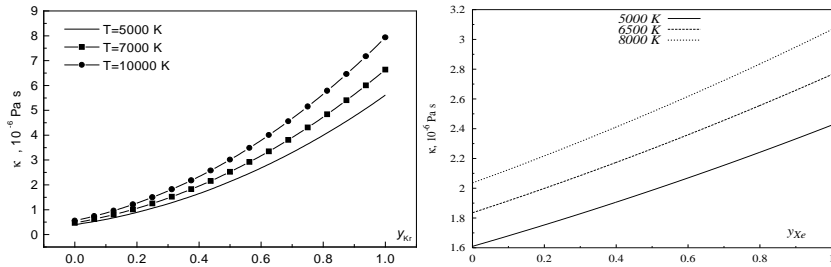


Рис. 11. Суміші $\text{He}, \text{Ar}^+, \text{Kr}$ та $\text{Ar}^+, \text{Kr}, \text{Xe}$. Залежність коефіцієнта об'ємної в'язкості від співвідношення концентрацій нейтральних компонент.

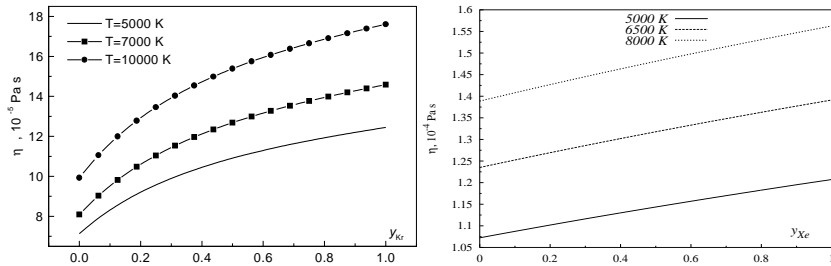


Рис. 12. Суміші $\text{He}, \text{Ar}^+, \text{Kr}$ та $\text{Ar}^+, \text{Kr}, \text{Xe}$. Залежність коефіцієнта зсувної в'язкості від співвідношення концентрацій нейтральних компонент.

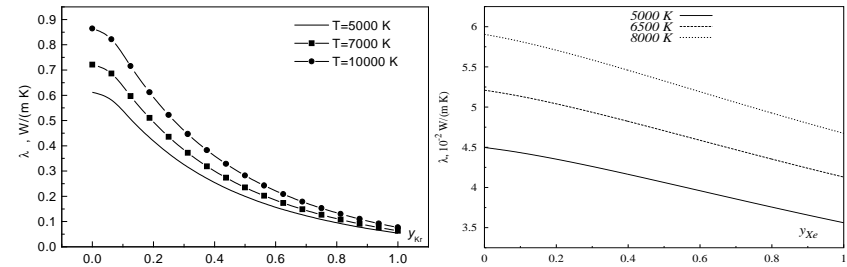


Рис. 13. Суміші $\text{He}, \text{Ar}^+, \text{Kr}$ та $\text{Ar}^+, \text{Kr}, \text{Xe}$. Залежність коефіцієнта теплопровідності від співвідношення концентрацій нейтральних компонент.

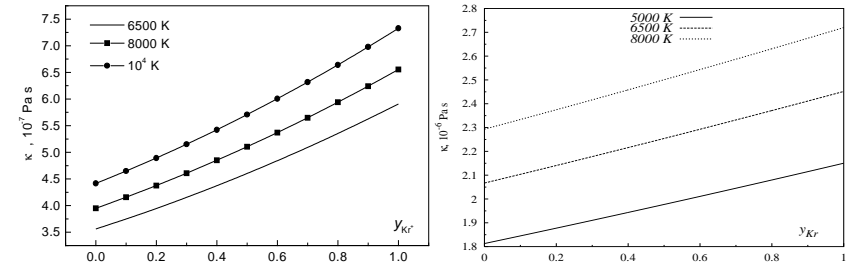


Рис. 14. Суміші $\text{He}, \text{Ar}^+, \text{Kr}^+$ та $\text{Ar}^+, \text{Kr}^+, \text{Xe}$. Залежність коефіцієнта об'ємної в'язкості від співвідношення концентрацій заряджених компонент.

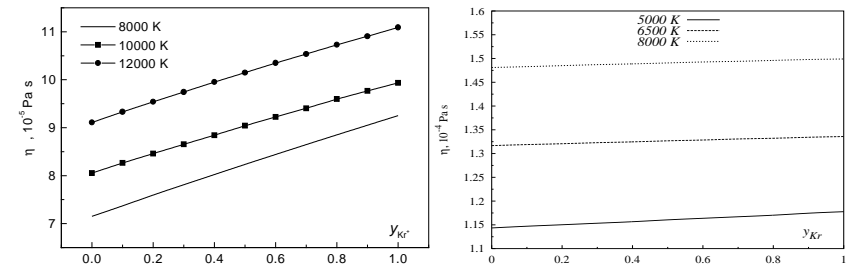


Рис. 15. Суміші $\text{He}, \text{Ar}^+, \text{Kr}^+$ та $\text{Ar}^+, \text{Kr}^+, \text{Xe}$. Залежність коефіцієнта зсувної в'язкості від співвідношення концентрацій заряджених компонент.

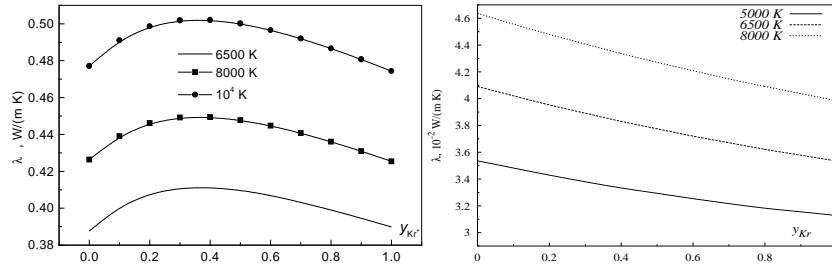


Рис. 16. Суміші He, Ar⁺, Kr⁺ та Ar⁺, Kr⁺, Xe. Залежність коефіцієнта теплопровідності від співвідношення концентрацій заряджених компонент.

6. Висновки

Отже, на основі кінетичного рівняння Енскога-Ландау для сумішей густих газів заряджених і незаряджених частинок отримано вирази для коефіцієнтів переносу (в'язкості, теплопровідності, дифузії та термодифузії), використовуючи метод Чепмена-Енскога. Зокрема, коли є більше ніж два сорти, то зручніше прийняти [52] інше означення (4.8) коефіцієнтів дифузії та термодифузії, які задовольняють при цьому співвідношення Онсагера.

Проведено числові розрахунки коефіцієнтів переносу різних сумішей для конкретних значень температури і концентрацій компонент. Єдиним параметром, що вибирався незалежно при розрахунках є діаметри твердих кульок σ_a .

Щодо поведінки коефіцієнтів переносу, то у всіх залежностях від співвідношення концентрацій можна помітити, що зі збільшенням вмісту важкої компоненти коефіцієнти в'язкості зростають, в той час як поведінка коефіцієнта теплопровідності є складнішою: для одних систем він спадає, для інших має максимум.

Література

1. Смирнов Б.М. Ионы и возбужденные атомы в плазме, М., Атомиздат, 1974.
2. Мак-Даниэль И., Мэзон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах, М., Мир, 1976.
3. Месси Г. Отрицательные ионы, М., Мир, 1979.
4. Смирнов Б.М. Отрицательные ионы, М., Атомиздат, 1978.

5. Райзер Ю.П. Физика газового разряда, М., Наука, 1987.
6. Рожанский В.А., Цендин Л.Д. Столкнительный перенос в частично-ионизованной плазме, М., Энергоатомиздат, 1998.
7. Велихов Е.П., Ковалев А.С., Рахимов А.Т. Физические явления в газоразрядной плазме, М., Наука, 1987.
8. Райзер Ю.П. Оптические разряды. Обзор // УФН, 1980, т.132, с.549.
9. Велихов Е.П., Голубев В.С., Пашкин С.В. Тлеющий разряд в потоке газа. Обзор // УФН, 1982, т.137, с.117.
10. Александров Н.Л., Напартович А.П. Процессы в газе и плазме с отрицательными ионами // УФН, 1993, т.163, N3, с.1-26.
11. Колоколов Н.Б., Благоев А.Б. Процессы ионизации и тушения возбужденных атомов с образованием быстрых электронов // УФН, 1993, т.163, N3, с.55-77.
12. Александров Н.Л., Охримовский А.М. Перенос заряженных частиц в слабоионизованной неравновесной плазме при наличии быстрых ионно-молекулярных процессов // Физика плазмы, 1996, т. 22, N1, с.82-87.
13. Чифлиян Р.В. Отрицательная дифференциальная проводимость электронов в смесях He-Kr и He-Xe в газоразрядной плазме // Физика плазмы, 1996, т. 22, N1, с.71-81.
14. Александров Н.Л., Охримовский А.М. Устойчивость слабоионизованной ион-ионной плазмы в сильном электрическом поле // Физика плазмы, 1997, т. 23, N1, с.77-80.
15. Ахмеджанов Р.А., Вихарев А.Л. и др. Влияние элетродинамической структуры СВЧ-разряда на эффективность диссоциации кислорода в воздухе // Физика плазмы, 1997, т. 23, N1, с.58-67.
16. Бруев О.А., Голота В.Т. та ін. Дослідження плазмохімічних реакторів синтезу озону на тліючому розряді атмосферного тиску // Укр. Фіз. Журн., 1998, т.43, N9, с. 1187-1189.
17. Murphy A.B. and Arundell G.J. Transport coefficients of argon, nitrogen, oxygen, argon-nitrogen and argon-oxygen plasmas // Plasma Chem. Plasma Process, 1994, v.14, N4, p.451-490.
18. Murphy A.B. Transport coefficients of air, argon-air, nitrogen-air and oxygen-air plasmas // Plasma Chem. Plasma Process, 1995, v.15, N2, p.279-307.
19. Murphy A.B. Transport coefficients of helium and argon-helium plasmas // IEEE transactions on plasma science, 1997, v.25, N5, p.809-814.
20. Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Омелян И.П., Токарчук М.В. О кинетических уравнениях для плотных газов и жидкостей. // ТМФ, 1991, том 87, No 1, с. 113 - 129.
21. Santos A, Garzó V. Self-diffusion in a dilute gas under heat and momentum transport. // Phys. Rev. A, 1992, vol. 46, No 6, p. 3276-3287.
22. Erpenbeck J.J. Transport coefficients of hard-sphere mixtures I. // Phys. Rev. A, 1989, vol. 39, No 9, p. 4718-4731.
23. Erpenbeck J.J. Transport coefficients of hard-sphere mixtures II. Diameter

- ratio 0.4 and mass ratio 0.03 at low density. // *Phys. Rev. A*, 1992, vol. 45, No 4, p. 2298-2307.
24. Назаренко И.И., Паневин И.Г. Упрощенный метод расчета электропроводности, электронной теплопроводности и термодиффузии аргона. // *ТВТ*, 1989, том 27, No 3, с. 482-489.
 25. Yoshida N. Concentration dependence of the self-diffusion coefficient of hard spheres in solution. // *Chem. Phys. Lett.*, 1983, vol. 101, No 6, p. 555-561.
 26. Pas M.F., Zwolinski B.J. Computation of the transport coefficients of dense fluid neon, argon, krypton and xenon by molecular dynamics. // *Mol. Phys.*, 1991, vol. 73, No 3, p. 471-481.
 27. Pas M.F., Zwolinski B.J. Computation of the transport coefficients of binary mixtures of argon-krypton, krypton-xenon and argon-xenon by molecular dynamics. // *Mol. Phys.*, 1991, vol. 73, No 3, p. 483-494.
 28. Banach Z. Extended thermodynamics of fluids versus the revised Enskog equation. // *Physica A*, 1987, vol. 145, p. 105-138.
 29. Grmela M., Garcia-Colin L.S. Compatibility of the Enskog kinetic theory with thermodynamics I. // *Phys. Rev. A*, 1980, vol. 22, No 3, p. 1295-1304.
 30. Grmela M., Garcia-Colin L.S. Compatibility of the Enskog-like kinetic theory with thermodynamics II. Chemically reacting fluids. // *Phys. Rev. A*, 1980, vol. 22, No 3, p. 1305-1314.
 31. Sarman S., Evans D.J. Heat flow and mass diffusion in binary Lennard-Jones mixtures I. // *Phys. Rev. A*, 1992, vol. 45, No 4, p. 2370-2379.
 32. Sarman S., Evans D.J. Heat flow and mass diffusion in binary Lennard-Jones mixtures II. // *Phys. Rev. A*, 1992, vol. 46, No 2, p. 1960-1966.
 33. Erpenbeck J.J., Wood W.W. Self-diffusion coefficient for the hard-sphere fluid. // *Phys. Rev. A*, 1991, vol. 43, No 8, p. 4254-4261.
 34. Schaink H.M., Hoheisel C. Molecular-dynamics study of the velocity-autocorrelation function and the self-diffusion coefficient in multicomponent mixtures. // *Phys. Rev. A*, 1992, vol. 45, No 12, p. 8559-8565.
 35. Галеев Р.И., Шурыгин В.Ю., Юльметьев Р.М. Вычисление сдвиговой вязкости и теплопроводности жидкого аргона методом сокращенного описания. // *УФЖ*, 1991, том 36, No 3, с. 396-400.
 36. Pan S., Storvick T.S. Kinetic theory calculations of pressure effects of diffusion. // *J. Chem. Phys.*, 1992, vol. 97, No 4, p. 2671-2681.
 37. Мельников А.В., Тарасян К.Н. Об определении коэффициента теплопроводности плазмы. // *ФП*, 1991, том 17, No 7, с. 880-884.
 38. Божокин С.В., Быков А.М. О процессах переноса в случайно-неоднородной плазме в магнитном поле. // *ФП*, 1990, том 16, No 6, с. 717-722.
 39. Александров Н.Л., Кочетов И.В. Электронные коэффициенты переноса в неравновесной слабоионизованной плазме при наличии кулоновских столкновений. // *ФП*, 1991, том 17, No 6, с. 728-734.
 40. Sarman S., Evans D.J., Baranyai A. Mutual and self-diffusion in fluids undergoing strong shear. // *Phys. Rev. A*, 1992, vol. 46, No 2, p. 893-902.

41. Kobryn A.E., Morozov V.G., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Enskog-Landau kinetic equation. Calculation of the transport coefficients for charged hard spheres. // *Physica A*, 1996, vol. 230, No 1&2, p. 189-201.
42. Kobryn A.E., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Normal solutions and transport coefficients to the Enskog-Landau kinetic equation for a two-component system of charged hard spheres. The Chapman-Enskog method. // *Physica A*, 1999, vol. 268, No 3&4, p. 275-297.
43. Kobryn A.E., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Nonstationary solution to the Enskog-Landau kinetic equation using boundary conditions method. // *Cond. Matt. Phys.*, 1996, No 8, p. 75-98.
44. Kobryn A.E., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Normal solution to the Enskog-Landau kinetic equation using boundary conditions method. // *Phys. Lett. A*, 1996, vol. 223, No 1&2, p. 37-44.
45. Зубарев Д.Н., Хонькин А.Д. Метод построения нормальных решений кинетических уравнений с помощью граничных условий. // *ТМФ*, 1972, том 11, No 3, с. 403-412.
46. Wallenborn J., Baus M. Kinetic theory of the shear viscosity of a strongly coupled classical one-component plasma. // *Phys. Rev. A*, 1978, vol. 18, No 4, p. 1737-1747.
47. Cauble R., Duderstadt J.J. Model kinetic theories of one-component plasmas. // *Phys. Rev. A*, 1981, vol. 23, p. 1969.
48. Rigby M., Smith E.B., Wakeham W.A., Matland G.C. The forces between molecules. Oxford, Clarendon Press, 1986.
49. Кобрин О.Є., Омелян І.П., Токарчук М.В. Кінетичне рівняння Енскога-Ландау для двокомпонентної густої плазми. Розв'язок, коефіцієнти переносу. / Препринт ІФКС-93-19У, Львів, 1993, 40 с.
50. Зубарев Д.Н., Морозов В.Г. Формулировка граничных условий к цепочке Боголобова с учетом локальных законов сохранения. // *ТМФ*, 1984, т.60, No 2, с.270-279.
51. Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов. М., Наука, 1971.
52. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М., Мир, 1976.
53. Токарчук М.В., Омелян І.П., Кобрин О.Є. Кінетичне рівняння Енскога-Ландау. Обчислення коефіцієнтів переносу для моделі заряджених твердих кульок, Львів, 1992 // Препринт АН України, ІФКС-92-22У, 36 с.
54. Голубев И.Ф., Гнездилов Н.Е. Вязкость газовых смесей, М., 1971, 328 с.
55. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей, М., 1972, 720 с.
56. Blum L., Noye J.S. Mean spherical model for asymmetric electrolytes II. Thermodynamic properties and pair correlation function. // *J. Phys. Chem.*, 1977, vol. 81, No 3, p. 1311-1316.
57. Lebowitz J.L. Exact solution of generalized Percus-Yevick equation for a mixture of hard spheres. // *Phys. Rev.*, 1964, vol. 133, No 4A, p. 895-889.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Михайло Васильович Токарчук
Олександр Євгенійович Кобрин
Йосип Андрійович Гуменюк

КОЕФІЦІЄНТИ ПЕРЕНОСУ СУМІШЕЙ ГУСТИХ ГАЗІВ ЗАРЯДЖЕНИХ ТА
НЕЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК

Роботу отримано 8 червня 1999 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені