Національна академія наук України

ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ICMP–99–11U

М.Ф. Головко, Є.М. Сов'як

ЕКРАНОВАНІ ПОТЕНЦІАЛИ ПРОСТОРОВО НЕОДНОРІДНОЇ СИСТЕМИ: ІОН-ДИПОЛЬНА СУМІШ - ПОРИСТЕ СЕРЕДОВИЩЕ

ЛЬВІВ

УДК: 532: 537.226; 541.135
PACS: 05.20.Gg, 61.25.-f, 78.55.Mb

Екрановані потенціали просторово неоднорідної системи: іон-дипольна суміш - пористе середовище

М.Ф. Головко, Є.М. Сов'як

Анотація. Розглянуто просторово неоднорідну двофазну систему точкових частинок іон-дипольної суміші в пористому середовищі з різкою плоскою межею поділу фаз. Для опису ефектів екранування електростатичних взаємодій використано реплічні просторово неоднорідні рівняння Орнштейна-Церніке. Отримано вирази для дво- та одночастинкових екранованих потенціалів та досліджено їх асимптотичну поведінку.

Screened potentials of spatially inhomogeneous system: ion-dypole mixture – porous media

M.F. Holovko, E.M. Sovyak

Abstract. A two-phase spatially inhomogeneous system of point-like particles of ion-dypole mixture in porous media with a sharp interfacial plain is considered. Replica nonuniform Ornstein-Zernike equation is used for the discription of screening effects of electrostatic interactions. The expressions for two- and one-particle screened potentials have been obtained and their asymptotics have been studied as well.

Подається в Cond. Matt. Phys.
Submitted to Cond. Matt. Phys.

1. Вступ

Останнім часом значна увага приділяється дослідженням структурних та термодинамічних властивостей розчинів електролітів у пористих матеріалах (полімерних мебранах, склах, різноманітних композиційних матеріалах, колоїдних гелях та ін.). Характерним для таких систем є фіксована конфігурація частинок, що дозволяє розглядати пористе середовище як систему з замороженою рівноважною конфігурацією частинок. Для дослідження властивостей бінарної системи рідина - пориста матриця широко використовується метод реплік [1]. Недавно Гівен і Стел [2] запропонували для вивчення структури такої суміші систему так званих реплічних рівнянь Орнштейна-Церніке. За допомогою цих рівнянь в [3] для системи іонів в пористому середовищі, а в [4] для системи іон-дипольна суміш - пориста матриця було досліджено вплив пористості на ефекти екранування електростатичних взаємодій точкових частинок. Більш детально огляд проблем, які виникають при дослідженні термодинаміки та структури заморожено-відпалених рідких систем приведено в [5].

В даній праці буде розглянуто просторово неоднорідну двофазну систему іон-дипольної суміші в пористому середовищі з плоскою різкою поверхнею поділу фаз. Застосовуючи просторово неоднорідну систему реплічних рівнянь Орнштейна-Церніке, досліджено вплив пористості на ефекти екранування електростатичної взаємодії точкових частинок.

2. Просторово неоднорідна система реплічних рівнянь Орнштейна-Церніке

Для дослідження структурних властивостей двофазної системи розчину електроліту використаємо підхід, що базується на реплічних рівняннях Орнштейна-Церніке [2,3]. Подібно, як звичайне рівняння Орнштейна-Церніке, їх можна узагальнити на випадок просторової неоднорідності. Для цього слід врахувати, що густини частинок є функціями координат, а пряма та парна кореляційні функції залежать від розташування кожної з двох частинок в просторі. Запишемо просторово-неоднорідні реплічні рівняння Орнштейна-Церніке у вигляді

$$
\begin{aligned}
h^{mm} &= c^{mm} + c^{mm}\rho^{m} \otimes h^{mm} \\
h^{ff(c)} &= c^{ff(c)} + c^{ff(c)}\rho^{f} \otimes h^{ff(c)} \\
h^{mf} &= c^{mf} + c^{mm}\rho^{m} \otimes h^{mf} + c^{mf}\rho^{f} \otimes h^{ff(c)} \\
h^{fm} &= c^{fm} + c^{ff(c)}\rho^{f} \otimes^{fm} + c^{fm}\rho^{m} \otimes h^{mm} \\
h^{ff'} &= c^{ff'} + c^{ff(c)}\rho^{f} \otimes h^{ff'} + c^{fm}\rho^{m} \otimes h^{mf} + c^{ff'}\rho^{f} \otimes h^{ff(c)} \\
h^{f'f} &= c^{f'f} + c^{f'f}\rho^{f} \otimes h^{ff(c)} + c^{f'm}\rho^{m} \otimes h^{mf} + h^{f'f} \otimes \rho^{f} c^{ff(c)}
\end{aligned}
\qquad (1)
$$

В (1) індекс "m" позначає приналежність частинки до підсистеми матриці пористого середовища, а індекс "f" до підсистеми рідинного середовища. Функції c і h відповідно прямі та парні кореляційні функції, а ρ - густина частинок. Символ $\otimes$ означає наступну операцію:

$$\otimes = \sum_{c} \int d\vec{R}_c d\Omega_c \qquad (2)$$

де $\vec{R}_c$ - радіус-вектор координат частинки сорту c, Ω_c - орієнтаційні координати частинки, ρ -профілі густини частинок. $\sum\limits_{c}$ означає сумування по всіх сортах частинок. $c^{ff'}$ і $h^{ff'}$ - так звані заморожені частини відповідно прямих і парних кореляційних функцій частинок рідинних підсистем двох різних копій

$$
\begin{aligned}
c^{ff(c)} &= c^{ff} - c^{ff'} \\
h^{ff(c)} &= h^{ff} - h^{ff'}
\end{aligned}
\qquad (3)
$$

- зв'язні частини відповідно для прямої та парної кореляційних функцій.

Далі розглядатимемо двофазну систему розчину електроліту в пористому середовищі з різкою плоскою межею поділу фаз. Для зручності виберемо декартову систему координат так, щоб межа поділу співпадала з площиною XOY. Всі величини, пов'язані з частинками верхнього напівпростору ($z > 0$), позначатимемо індексом "+", а нижнього ($z < 0$) індексом "$-$". Профіль густини частинок сорту "c" рідинної чи пористої підсистем має вигляд

$$\rho_c^{\alpha}(\vec{R}_c, \Omega_c) = \begin{cases} \rho_c^{\alpha(+)}(\vec{R}_c, \Omega_c), & z_c > 0, \\ rho_c^{\alpha(-)}(\vec{R}_c, \Omega_c), & z_c < 0, \end{cases} \quad (\alpha = f \text{ або } m). \qquad (4)$$

Розчини електроліту, які знаходяться у верхньому і нижньому напівпросторах, моделюватимемо сумішшю точкових іонів і диполів. Подібним чином змоделюємо пористі матриці верхнього та нижнього напівпросторів.

Співставимо тепер прямі кореляційні функції з відповідними потенціалами електростатичної взаємодії

$$
\begin{aligned}
c_{ab}^{\alpha\beta}(\vec{R}_a,\vec{R}_b) &= -\frac{1}{T}\hat{Q}_a^{\alpha}(\Omega_a)\hat{Q}_b^{\beta}(\Omega_b)\frac{1}{\mid \vec{R}_a-\vec{R}_b \mid}, \\
c_{ab}^{ff'}(\vec{R}_a,\vec{R}_b) = 0, &\qquad (\alpha,\beta = m \text{ або } f).
\end{aligned} \tag{5}
$$

Остання рівність відповідає невзаємодії частинок рідинного середовища двох різних реплік.

$\hat{Q}_a^{\alpha}(\Omega_a)$ - оператор узагальненого електростатичного заряду

$$
\hat{Q}_a^{\alpha}(\Omega_a) = eZ_a^{\alpha} + \vec{m}_a^{\alpha}\cdot\vec{\bigtriangledown}_a, \tag{6}
$$

де в (6) e - елементраний заряд, Z_a^{α} - валентність, а $\vec{m}_a^{\alpha}$ - дипольний момент частинки сорту a, $\vec{\bigtriangledown}_a$ - оператор градієнта по координатах частинки сорту a, T - абсолютна температура, вимірювана в енергетичних одиницях.

Парна кореляційна функція в цьому випадку матиме значення екранованого потенціалу. Подібно, як пряму кореляційну функцію, представимо її у вигляді:

$$
h_{ab}^{\alpha\beta}(\vec{R}_a,\vec{R}_b) = \hat{Q}_a^{\alpha}(\Omega_a)\hat{Q}_b^{\beta}(\Omega_b)G^{\alpha\beta}(\vec{R}_a,\vec{R}_b), (\alpha,\beta = m \text{ або } f) \tag{7}
$$

Введемо тепер односторонні функції подібно як це зроблено в [6,7]:

$$
\begin{aligned}
G_{+}^{\alpha\beta}(\vec{R}_a,\vec{R}_b) &= \begin{cases} G^{\alpha\beta}(\vec{R}_a,\vec{R}_b), & \vec{R}_a \in V^{+}, \\ 0, & \vec{R}_a \in V^{-}, \end{cases} \\
G_{-}^{\alpha\beta}(\vec{R}_a,\vec{R}_b) &= \begin{cases} 0, & \vec{R}_a \in V^{+}, \\ -G^{\alpha\beta}(\vec{R}_a,\vec{R}_b), & \vec{R}_a \in V^{-}. \end{cases}
\end{aligned} \tag{8}
$$

V^{+} і V^{-} позначають відповідно верхній та нижній напівпростори.

Відмітимо, що в цьому випадку фур'є-образи односторонніх функцій $\tilde{G}_{+}^{\alpha\beta}(p,q_1,q_2)$ та $\tilde{G}_{-}^{\alpha\beta}(p,q_1,q_2)$ є відповідно аналітичними по змінній q_1 у верхній та нижній комплексних напівплощинах. q_1 та q_2 - проекції тривимірних векторів фур'є-перетворення $\vec{k}_1$ і $\vec{k}_2$ на вісь OZ, p - модуль проекції вектора $(\vec{k}_1-\vec{k}_2)$ на площину XOY.

Підставимо (4)-(8) у систему рівнянь (1) і здійснимо в них фур'є-перетворення. Усереднення по орієнтаційних степенях вільності дає:

$$
\begin{aligned}
&\sum_c \frac{4\pi}{T}\int d\Omega_c Q_c^{\alpha}(q_1)\hat{Q}_c^{\alpha}(\Omega_c) = \\
&= (\kappa^{\alpha})^2 + (\varepsilon^{\alpha}-1)p^2 + iq_1(\varepsilon^{\alpha}-1)\frac{d}{dz_c}
\end{aligned} \tag{9}
$$

де:

$$
(\kappa^{\alpha})^2 = \sum_c \frac{4\pi}{T}\rho_c^{\alpha}e^2(Z_c^{\alpha})^2 \tag{10}
$$

- обернений квадрат радіуса дебаївського екранування,

$$
\varepsilon^{\alpha} - 1 = \frac{1}{3}\sum_c \frac{4\pi}{T}\rho_c^{\alpha}(m_c^{\alpha})^2 \tag{11}
$$

- самоузгоджена частина діелектричної сталої.

Відповідні фізичні параметри, розраховані для верхньої чи нижньої фаз відрізнятимуться індексами "+" чи "−".

Після фур'є-перетворення в (11) замість реплічних рівнянь Орнштейна-Церніке отримаємо наступну систему задач Рімана для фур'є-образів односторонніх екранованих потенціалів

$$
\begin{aligned}
P_{+}^{\alpha}(q_1)\tilde{G}_{+}^{\alpha\beta}(q_1,q_2) - P_{-}^{\alpha}(q_1)\tilde{G}_{-}^{\alpha\beta}(q_2) = D^{\alpha\beta}(q_1,q_2), \\
(\alpha,\beta = m, f \text{ або } f'),
\end{aligned} \tag{12}
$$

де коефіцієнти при невідомих функціях рівні:

$$
P_{\pm}^{\gamma}(q_1) = \varepsilon_{\pm}^{\gamma}\left[q_1^2 + (\alpha_{\pm}^{\gamma}(p))^2\right], \tag{13}
$$

$$
(\alpha_{\pm}^{\gamma}(p))^2 = p^2 + \frac{(\kappa_{\pm}^{\gamma})^2}{\varepsilon_{\pm}^{\gamma}}, \quad (\gamma = m \text{ або } f). \tag{14}
$$

Відмітимо, що в коефіцієнтах $P_{\pm}^{\gamma}(q_1)$ фур'є-образах односторонніх екранованих потенціалів, вільних членах ми опустимо залежність від p, розуміючи, що всі ці величини залежать від плоского вектора, як від параметра. Функції $D^{\alpha\beta}(q_1,q_2)$, які відіграють роль вільних членів в рівняннях (12), рівні:

$$
\begin{aligned}
D^{mm}(q_1,q_2) &= -\frac{4\pi}{T}\delta(q_1+q_2) + iq_1(\varepsilon_{+}^{m}-\varepsilon_{-}^{m})\tilde{G}^{mm}(q_2) \\
D^{ff(c)}(q_1,q_2) &= -\frac{4\pi}{T}\delta(q_1+q_2) + iq_1(\varepsilon_{+}^{f}-\varepsilon_{-}^{f})\tilde{G}^{ff(c)}(q_2) \\
D^{mf}(q_1,q_2) &= (q_1^2+p^2)\left[\tilde{G}_{+}^{ff(c)}(q_1,q_2) - \tilde{G}_{-}^{ff(c)}(q_1,q_2)\right] + \\
&+ iq_1(\varepsilon_{+}^{m}-\varepsilon_{-}^{m})G^{mf}(q_2) \\
D^{fm}(q_1,q_2) &= (q_1^2+p^2)\left[\tilde{G}_{+}^{mm}(q_1,q_2) - \tilde{G}_{-}^{mm}(q_1,q_2)\right] + \\
&+ iq_1(\varepsilon_{+}^{f}-\varepsilon_{-}^{f})G^{fm}(q_2) \\
D^{ff'}(q_1,q_2) &= (q_1^2+p^2)\left[\tilde{G}_{+}^{mf}(q_1,q_2) - \tilde{G}_{-}^{mf}(q_1,q_2)\right] -
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& - \quad (q_1^2+p^2)\left[\tilde{G}_+^{ff(c)}(q_1,q_2)-\tilde{G}_-^{ff(c)}(q_1,q_2)\right]+\\
& + \quad iq_1(\varepsilon_+^f-\varepsilon_-^f)G^{ff'}(q_2)\\
D^{f'f}(q_1,q_2) &= \quad (q_1^2+p^2)\left[\tilde{G}_+^{mf}(q_1,q_2)-\tilde{G}_-^{mf}(q_1,q_2)\right]-\\
& - \quad (q_1^2+p^2)\left[\tilde{G}_+^{ff(c)}(q_1,q_2)-\tilde{G}_-^{ff(c)}(q_1,q_2)\right]+\\
& + \quad iq_1(\varepsilon_+^f-\varepsilon_-^f)G^{ff'}(q_2) \qquad (15)
\end{aligned}
$$

$\delta(q_1+q_2)$ - дельта-функція Дірака, $G^{mm}(q_2),\ldots,G^{ff'}(q_2)$ - відповідають фур'є-образам від значення екранованих потенціалів, коли перша частинка знаходиться на межі поділу фаз. Цей доданок виникає від оператора дипольного моменту, наявності оператора диференціювання у виразі (9). Специфіка розв'язку системи рівнянь (12) полягає в тому, що їх необхідно розв'язувати послідовно. Тобто спочатку необхідно визначити функції $\tilde{G}_\pm^{mm}(q_1,q_2)$ та $\tilde{G}_\pm^{ff(c)}(q_1,q_2)$, потім функції $\tilde{G}_\pm^{mf}(q_1,q_2)$ та $\tilde{G}_\pm^{fm}(q_1,q_2)$ і накінець заморожену частину екранованого потенціалу $G_\pm^{ff'}(q_1,q_2)$.

3. Розв'язок системи задач Рімана

Розглянемо одне з рівнянь (12). Допустимо, що вільний член цього рівняння відомий

$$P_+^\alpha(q_1\tilde{G}_+^{\alpha\beta}(q_1,q_2)-P_-^\alpha(q_1)\tilde{G}_-^{\alpha\beta}(q_1,q_2)=D^{\alpha\beta}(q_1,q_2). \qquad (16)$$

Нагадаємо, що фур'є-образи екранованих потенціалів є аналітичними по змінній q_1 функціями відповідно у верхній та нижній комплексній напівплощинах. Згідно [8,6] факторизуємо рівняння (16). Для цього представимо відношення коефіцієнтів при невідомих функціях у вигляді

$$\frac{P_-^\alpha(q_1)}{P_+^\alpha(q_1)}=\frac{X_+^\alpha(q_1)}{X_-^\alpha(q_1)}, \qquad (17)$$

де: $X_+^\alpha(q_1)$ та $X_-^\alpha(q_1)$ - аналітичні відповідно у верхній та нижній комплексних напівплощинах функції і такі, що не мають в цих областях нулів, включаючи і дійсну вісь. Оскільки $P_\pm^\alpha(q_1)$ - поліноми другого степеня по змінній q_1, факторизуючі функції легко знайти.

$$X_+^\alpha(q_1)=\frac{\sqrt{\varepsilon_-^\alpha}(q_1+i\alpha_-^\alpha)}{\sqrt{\varepsilon_+^\alpha}(q_1+i\alpha_+^\alpha)},$$

$$X_-^\alpha(q_1)=\frac{\sqrt{\varepsilon_+^\alpha}(q_1-i\alpha_+^\alpha)}{\sqrt{\varepsilon_-^\alpha}(q_1-i\alpha_-^\alpha)}. \qquad (18)$$

Використовуючи (17) та (18), рівняння (16) перепишемо у вигляді

$$\frac{\tilde{G}_+^{\alpha\beta}(q_1'q_2)}{X_+^\alpha(q_1)}-\frac{\tilde{G}_-^{\alpha\beta}(q_1'q_2)}{X_-^\alpha(q_1)}=\frac{D^{\alpha\beta}(q_1'q_2)}{X_+^\alpha(q_1)P_+^\alpha(q_1)}. \qquad (19)$$

Функції $\tilde{G}_+^{\alpha\beta}(q_1,q_2)/X_+^\alpha(q_1)$ та $\tilde{G}_-^{\alpha\beta}(q_1q_2)/X_-^\alpha(q_1)$ - аналітичні відповідно у верхній та нижній комплексних напівплощинах. Вільний член рівняння (19) представимо у вигляді різниці двох функцій аналітичних по змінній q_1 також у верхній та нижній напівплощинахкомплексної площини, а саме:

$$\frac{D^{\alpha\beta}(q_1'q_2)}{X_+^\alpha(q_1)P_+^\alpha(q_1)}=\Psi_+^{\alpha\beta}(q_1,q_2)-\Psi_-^{\alpha\beta}(q_1,q_2). \qquad (20)$$

Функції $\Psi_\pm^\alpha(q_1,q_2)$ можна знайти, якщо скористатися оператором проектування функції на область аналітичності [8]. Тоді

$$\Psi_\pm^{\alpha\beta}(q_1,q_2)=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dq\frac{D^{\alpha\beta}(q,q_2)}{P_+^\alpha(q)X_+^\alpha(q)}\delta_\pm(q_1-q). \qquad (21)$$

$\delta_\pm(q)$ - односторонні дельта функції [8].

Оскільки індекс нашої задачі Рімана, тобто різниця між кількістю нулів і полюсів функції $P_-^\alpha(q_1/P_+^\alpha(q_1)$ у верхній чи нижній комплексній напівплощинах, рівний нулеві, то розв'язок задачі (19) при визначених функціях $\Psi_\pm^\alpha(q_1)$ запишеться у вигляді:

$$\tilde{G}_\pm^{\alpha\beta}(q_1,q_2)=X_\pm^\alpha(q_1)\Psi_\pm^{\alpha\beta}(q_1,q_2). \qquad (22)$$

Визначимо функції $\Psi_\pm^{\alpha\beta}(q_1,q_2)$. Згідно (13) та (18) маємо

$$P_+^\alpha(q_1)X_+^\alpha(q_1)=\sqrt{\varepsilon_+^\alpha\varepsilon_-^\alpha}(q_1-i\alpha_+^\alpha)(q_1+i\alpha_-^\alpha). \qquad (23)$$

Для односторонніх $\delta_\pm(x)$-функцій використаємо представлення [8]

$$\delta_\pm(x)=-\frac{1}{2i}\lim_{\delta\to 0}\frac{1}{x\pm i\delta},\ (\delta>0). \qquad (24)$$

Враховуючи (23) і (24), замість (21) отримаємо наступний вираз:

$$
\begin{aligned}
\Psi_\pm^{\alpha\beta}(q_1,q_2) &= \frac{1}{2\pi i\sqrt{\varepsilon_+^\alpha\varepsilon_-^\alpha}}\times\\
&\times \lim_{\delta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}dq\frac{D^{\alpha\beta}(q_1'q_2)}{(q-i\alpha_+^\alpha)(q+i\alpha_-^\alpha)}\frac{1}{(q-q_1\mp i\delta)}. \qquad (25)
\end{aligned}
$$

В (25) ми поміняли знак аргумента в односторонній дельта-функції. Підставимо в (25) вираз для $D^{mm}(q_1,q_2)$ з (15). Матимемо

$$\begin{aligned}
\Psi^{mm}_{\pm}(q_1,q_2) &= \frac{1}{2\pi i\sqrt{\varepsilon^m_+\varepsilon^m_-}}\lim_{\delta\to 0}\int_{-\infty}^{+\infty}dq\,\times\\
&\times \frac{1}{(q-i\alpha^{\alpha}_+)(q+i\alpha^{\alpha}_-)(q-q_1\mp i\delta)}\times\\
&\times \left\{-\frac{4\pi}{T}\delta(q+q_2)+iq(\varepsilon^m_+-\varepsilon^m_-)G^{mm}(q_2)\right\}=\\
&= -\frac{4\pi}{T}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon^m_+\varepsilon^m_-}}\frac{\delta\pm(q_1+q_2)}{(q_2+i\alpha^m_+)(q_2-i\alpha^m_-)}\pm\\
&\pm\ i\frac{\alpha^m_\mp(\varepsilon^m_+-\varepsilon^m_-)}{\sqrt{\varepsilon^m_+\varepsilon^m_-}(\alpha^m_++\alpha^m_-)}\frac{1}{q_1\pm i\alpha^m_\mp}G^{mm}(q_2)
\end{aligned}\tag{26}$$

Аналогічний вираз отримаємо для функцій $\Psi^{ff}_{\pm}(q_1,q_2)$, для цього в (26) індекс "m" слід поміняти на "f".

$$\begin{aligned}
\Psi^{ff(c)}_{\pm}(q_1,q_2) &= -\frac{4\pi}{T}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon^f_+\varepsilon^f_-}}\frac{\delta_\pm(q_1+q_2)}{(q_2+i\alpha^f_+)(q_2-i\alpha^f_-)}\pm\\
&\pm\ i\frac{\alpha^f_\mp(\varepsilon^f_+-\varepsilon^f_-)}{\sqrt{\varepsilon^f_+\varepsilon^f_-}(\alpha^f_++\alpha^f_-)}\frac{1}{q_1\pm i\alpha^f_\mp}G^{ff(c)}(q_2).
\end{aligned}\tag{27}$$

Аналогічним чином знайдемо вирази для інших функцій $\Psi^{\alpha\beta}_{\pm}(q_1,q_2)$:

$$\begin{aligned}
\Psi^{mf}_{\pm}(q_1,q_2) &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^m_+\varepsilon^m_-}}\frac{q_1^2+p^2}{(q_1-i\alpha^m_+)(q_1+i\alpha^m_-)}\tilde G^{ff(c)}_{\pm}(q_1,q_2)-\\
&- \frac{i}{\sqrt{\varepsilon^m_+\varepsilon^m_-}}\frac{1}{\alpha^m_++\alpha^m_-}\left[\frac{(\alpha^m_+)^2-p^2}{q_1-i\alpha^m_+}\tilde G^{ff(c)}_+(i\alpha^m_+)-\right.\\
&- \left.\frac{(\alpha^m_-)^2-p^2}{q_1+i\alpha^m_-}\tilde G^{ff(c)}_-(-i\alpha^m_-)\right]+\\
&+ \frac{i}{\sqrt{\varepsilon^m_+\varepsilon^m_-}}\frac{\alpha^m_\mp(\varepsilon^m_+-\varepsilon^m_-)}{\alpha^m_++\alpha^m_-}\frac{1}{q_1\pm i\alpha^m_\mp}G^{mf}(q_2).
\end{aligned}\tag{28}$$

Вираз для функції $\Psi^{fm}(q_1,q_2)$ отримується шляхом заміни у виразі (28) індексів "m" на "f" і навпаки. Тоді

$$\begin{aligned}
\Psi^{fm}_{\pm}(q_1,q_2) &= \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^f_+\varepsilon^f_-}}\frac{q_1^2+p^2}{(q_1-i\alpha^f_+)(q_1+i\alpha^f_-)}\tilde G^{mm}_{\pm}(q_1,q_2)-\\
&- \frac{i}{\sqrt{\varepsilon^f_+\varepsilon^f_-}}\frac{1}{\alpha^f_++\alpha^f_-}\left[\frac{(\alpha^f_+)^2-p^2}{q_1-i\alpha^f_+}\tilde G^{mm}_+(i\alpha^f_+)-\right.\\
&- \left.\frac{(\alpha^f_-)^2-p^2}{q_1+i\alpha^f_-}\tilde G^{mm}_-(-i\alpha^f_-)\right]+\\
&+ \frac{i}{\sqrt{\varepsilon^f_+\varepsilon^f_-}}\frac{\alpha^f_\mp(\varepsilon^f_+-\varepsilon^f_-)}{\alpha^f_++\alpha^f_-}\frac{1}{q_1\pm i\alpha^f_\mp}G^{fm}(q_2)
\end{aligned}\tag{29}$$

Накінець для $\Psi^{ff'}_{\pm}(q_1,q_2)$ маємо:

$$\begin{aligned}
&\Psi^{ff'}_{\pm}(q_1,q_2)=\\
&=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon^f_+\varepsilon^f_-}}\frac{q_1^2+p^2}{(q_1-i\alpha^f_+)(q_1+i\alpha^f_-}\times\\
&\times\left[\tilde G^{mf}_+(q_1)-\tilde G^{ff(c)}_+(q_1,q_2)\right]-\\
&-\frac{i}{\sqrt{\varepsilon^f_+\varepsilon^f_-}}\frac{(\alpha^f_+)^2-p^2}{(\alpha^f_++\alpha^f_-)(q_1-i\alpha^f_+)}\left[\tilde G^{mf}_+(i\alpha^f_+)-\tilde G^{ff(c)}_+(i\alpha^f_+)\right]+\\
&+\frac{i}{\sqrt{\varepsilon^f_+\varepsilon^f_-}}\frac{(\alpha^f_-)^2-p^2}{(\alpha^f_++\alpha^f_-)(q_1+i\alpha^f_-)}\left[\tilde G^{mf}_-(-i\alpha^f_-)-\tilde G^{ff(c)}_-(-i\alpha^f_-)\right]\pm\\
&\pm\frac{i}{\sqrt{\varepsilon^f_+\varepsilon^f_-}}\frac{\alpha^f_\mp(\varepsilon^f_+-\varepsilon^f_-)}{(\alpha^f_++\alpha^f_-)(q\pm i\alpha^f_\mp)}G^{ff'}(q_2)
\end{aligned}\tag{30}$$

Граничні значення екранованих потенціалів знаходяться з умови [8]

$$\lim_{|q_1|\to\infty}\left\{iq_1\tilde G^{\alpha\beta}_{\pm}(q_1,q_2)+G^{\alpha\beta}(q_2)\right\}=0.\tag{31}$$

Остання умова є умовою існування прямого і оберненого фур'є-перетворення для односторонніх екранованих потенціалів.

4. Фур'є-образи екранованих потенціалів

Співвідношення (26) - (30) згідно (22) дозволяють визначити фур'є-образи односторонніх екранованих потенціалів з точністю до функцій $G^{\alpha\beta}(q_2)$. Розглянемо спочатку рівняння, яке описує екранування взаємодії між часттинками матриці пористого середовища. Використавши (31) та (26) для функціґ $\tilde{G}^{mm}_{+}(q_1,q_2)$ маємо:

$$\frac{2\pi}{\varepsilon^m_+ T}\frac{1}{(q_2+i\alpha^m_+)(q_2-i\alpha^m_-)}-\frac{\alpha^m_-(\varepsilon^m_+-\varepsilon^m_-)}{\varepsilon^m_+(\alpha^m_++\alpha^m_-)}G^{mm}(q_2)+G^{mm}(q_2)=0. \tag{32}$$

Звідси:

$$G^{mm}(q_2)=-\frac{2\pi}{T}\frac{\alpha^m_++\alpha^m_-}{\varepsilon^m_+\alpha^m_++\varepsilon^m_-\alpha^m_-}\frac{1}{(q_2+i\alpha^m_+)(q_2-i\alpha^m_-)}. \tag{33}$$

Легко переконатися, що підстановка $G^{mm}_{-}(q_1,q_2)$ в (31) приводить до того ж результату.

Подібним чином для зв'язної частини екранування взаємодії між частинками рідинного середовища отримаємо:

$$G^{ff(c)}(q_2)=-\frac{2\pi}{T}\frac{\alpha^f_++\alpha^f_-}{\varepsilon^f_+\alpha^f_++\varepsilon^f_-\alpha^f_-}\frac{1}{(q_2+i\alpha^f_+)(q_2-i\alpha^f_-)}. \tag{34}$$

Для інших екранованих потенціалів маємо:

$$\begin{aligned}G^{mf}(q_2) &= \frac{\alpha^m_++\alpha^m_-}{\varepsilon^m_+\alpha^m_++\varepsilon^m_-\alpha^m_-}G^{ff(c)}(q_2)- \\ &- \frac{[(\alpha^m_+)^2-p^2]\tilde{G}^{ff(c)}_{+}(i\alpha^m_+,q_2)-[(\alpha^m_-)^2-p^2]\tilde{G}^{ff(c)}_{-}(-i\alpha^m_-,q_2)}{\varepsilon^m_+\alpha^m_++\varepsilon^m_-\alpha^m_-}\end{aligned} \tag{35}$$

$$\begin{aligned}G^{fm}(q_2) &= \frac{\alpha^f_++\alpha^f_-}{\varepsilon^f_+\alpha^f_++\varepsilon^f_-\alpha^f_-}G^{mm}(q_2)- \\ &- \frac{[(\alpha^f_+)^2-p^2]\tilde{G}^{mm}_{+}(i\alpha^f_+,q_2)-[(\alpha^f_-)^2-p^2]\tilde{G}^{mm}_{-}(-i\alpha^f_-,q_2)}{\varepsilon^f_+\alpha^f_++\varepsilon^f_-\alpha^f_-}\end{aligned} \tag{36}$$

$$\begin{aligned}G^{ff'}(q_2) &= \frac{\alpha^f_++\alpha^f_-}{\varepsilon^f_+\alpha^f_++\varepsilon^f_-\alpha^f_-}\left[G^{mf}(q_2)-G^{ff(c)}(q_2)\right]- \\ &- \frac{(\alpha^f_+)^2-p^2}{\varepsilon^f_+\alpha^f_++\varepsilon^f_-\alpha^f_-}\left[\tilde{G}^{mf}(i\alpha^f_+,q_2)-\tilde{G}^{ff(c)}_{+}(i\alpha^f_+,q_2)\right]+ \\ &+ \frac{(\alpha^m_-)^2-p^2}{\varepsilon^f_+\alpha^f_++\varepsilon^f_-\alpha^f_-}\left[\tilde{G}^{mf}_{-}(-i\alpha^f_-,q_2)-\tilde{G}^{ff(c)}_{-}(-i\alpha^f_-,q_2)\right]\end{aligned} \tag{37}$$

Для того, щоб не нагромаджувати викладки, ми не розписуватимемо вирази для функцій $G^{\alpha\beta}(q_2)$ (35) - (37). В результаті всі ці функції можна привести до такого вигляду, де вони виражаються через $G^{mm}(q_2)$, $G^{ff}(q_2)$ та фур'є-образи екранованих потенціалів $\tilde{G}^{mm}_{\pm}(q_1,q_2)$ і $\tilde{G}^{ff(c)}_{\pm}(q_1,q_2)$ при певних значеннях змінної q_1 в точках $\pm i\alpha^m_{\pm}$, $\pm i\alpha^f_{\pm}$.

Співвідношення (33) - (37) дають можливість отримати вигляд фур'є-образів екранованих потенціалів. Підставляючи (18), (26) - (30) та (33) - (37) у отриманий розв'язок задачі Рімана (22), знайдемо фур'є-образи односторонніх екранованих потенціалів

$$\begin{aligned}\tilde{G}^{mm}_{\pm}(q_1,q_2) &= -\frac{4\pi}{\varepsilon^m_{\pm}T}\frac{1}{q_1\pm i\alpha^m_{\pm}}\frac{1}{(q_2+i\alpha^m_+)(q_2-i\alpha^m_-)}\times \\ &\times \left\{(q_1\pm i\alpha^m_{\mp})\delta_{\pm}(q_1+q_2)\pm\frac{i}{2}\frac{\alpha^m_{\mp}(\varepsilon^m_+-\varepsilon^m_-)}{\varepsilon^m_+\alpha^m_++\varepsilon^m_-\alpha^m_-}\right\}.\end{aligned} \tag{38}$$

Для зв'язної частини екранованого потенціалу частинок рідинного середовища маємо:

$$\begin{aligned}\tilde{G}^{ff(c)}_{\pm}(q_1,q_2) &= -\frac{4\pi}{\varepsilon^f_{\pm}T}\frac{1}{q_1\pm i\alpha^f_{\pm}}\frac{1}{(q_2+i\alpha^f_+)(q_2-i\alpha^f_-)}\times \\ &\times \left\{(q_1\pm i\alpha^f_{\mp})\delta_{\pm}(q_1+q_2)\pm\frac{i}{2}\frac{\alpha^f_{\mp}(\varepsilon^f_+-\varepsilon^f_-)}{\varepsilon^f_+\alpha^f_++\varepsilon^f_-\alpha^f_-}\right\}.\end{aligned} \tag{39}$$

Для фур'є-образів екранованої взаємодії між частинками матриць пористого середовища і рідини отримуємо наступні вирази:

$$\begin{aligned}\tilde{G}^{mf}_{\pm}(q_1,q_2) &= \frac{1}{\varepsilon^m_{\pm}}\frac{1}{q_1^2+(\alpha^m_{\pm})^2}\Big[(q_1^2+p^2)\tilde{G}^{ff(c)}_{\pm}(q_1,q_2)- \\ &- (p^2-(\alpha^m_{\pm})^2)\tilde{G}^{ff(c)}_{\pm}(\pm i\alpha^m_{\pm},q_2)\Big]+ \\ &+ \frac{1}{\varepsilon^m_+\alpha^m_++\varepsilon^m_-\alpha^m_-}\frac{i}{q_1\pm i\alpha^m_{\pm}}\times \\ &\times \Big[(p^2-(\alpha^m_+)^2)\tilde{G}^{ff(c)}_{+}(i\alpha^m_+,q_2)-\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&- \quad (p^2-(\alpha_-^m)^2)\tilde{G}_-^{ff(c)}(-i\alpha_-^m,q_2)\Big] \pm \\
&\pm \quad \frac{1}{\varepsilon_\pm^m}\frac{i\alpha_\mp^m(\varepsilon_+^m-\varepsilon_-^m)}{\varepsilon_+^m\alpha_+^m+\varepsilon_-^m\alpha_-^m}G^{ff(c)}(q_2), \qquad (40)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{G}_\pm^{fm}(q_1,q_2) \quad = \quad & \frac{1}{\varepsilon_\pm^f}\frac{1}{q_1^2+(\alpha_\pm^f)^2}\Big[(q_1^2+p^2)\tilde{G}_\pm^{mm}(q_1,q_2)- \\
- \quad & (p^2-(\alpha_\pm^f)^2)\tilde{G}_\pm^{mm}(\pm i\alpha_\pm^f,q_2)\Big] + \\
+ \quad & \frac{1}{\varepsilon_+^f\alpha_+^f+\varepsilon_-^f\alpha_-^f}\frac{i}{q_1\pm i\alpha_\pm^f} \times \\
\times \quad & \Big[(p^2-(\alpha_+^f)^2)\tilde{G}_+^{mm}(i\alpha_+^f,q_2)- \\
- \quad & (p^2-(\alpha_-^f)^2)\tilde{G}_-^{mm}(-i\alpha_-^f,q_2)\Big] \pm \\
\pm \quad & \frac{1}{\varepsilon_\pm^f}\frac{i\alpha_\mp^f(\varepsilon_+^f-\varepsilon_-^f)}{\varepsilon_+^f\alpha_+^f+\varepsilon_-^f\alpha_-^f}G^{mm}(q_2). \qquad (41)
\end{aligned}
$$

Для замороженої частини екранованої взаємодії між частинками рідинної фази різних реплік маємо:

$$
\begin{aligned}
&\tilde{G}_\pm^{ff'}(q_1,q_2) = \\
&= \frac{1}{\varepsilon_\pm^f}\frac{1}{q_1^2+(\alpha_\pm^f)^2}\Big\{(q_1^2+p^2)\Big[\tilde{G}_\pm^{mf}(q_1,q_2)-\tilde{G}_\pm^{ff(c)}(q_1,q_2)\Big] - \\
&-(p^2-(\alpha_\pm^f)^2)\Big[\tilde{G}_\pm^{mf}(i\alpha_+^f,q_2)-\tilde{G}_\pm^{ff(c)}(i\alpha_+^f,q_2)\Big]\Big\} + \\
&+\frac{1}{\varepsilon_\pm^f}\frac{p^2-(\alpha_+^f)^2}{q_1\pm i\alpha_\pm^f}\frac{i\alpha_\mp^f(\varepsilon_+^f-\varepsilon_-^f)}{\varepsilon_+^f\alpha_+^f+\varepsilon_-^f\alpha_-^f}\Big[\tilde{G}_+^{mf}(i\alpha_+^f,q_2)-\tilde{G}_+^{ff(c)}(i\alpha_+^f,q_2)\Big] - \\
&-\frac{1}{\varepsilon_\pm^f}\frac{p^2-(\alpha_-^f)^2}{q_1\pm i\alpha_\pm^f}\frac{i\alpha_\mp^f(\varepsilon_+^f-\varepsilon_-^f)}{\varepsilon_+^f\alpha_+^f+\varepsilon_-^f\alpha_-^f} \times \\
&\times\Big[\tilde{G}_-^{mf}(-i\alpha_+^f,q_2)-\tilde{G}_-^{ff(c)}(-i\alpha_-^f,q_2)\Big] + \\
&+\frac{1}{\varepsilon_\pm^f}\frac{i\alpha_\mp^f(\varepsilon_+^f-\varepsilon_-^f)}{\varepsilon_+^f\alpha_+^f+\varepsilon_-^f\alpha_-^f}\frac{1}{q_1\pm i\alpha_\pm^f}\Big[G^{mf}(q_2)-G^{ff(c)}(q_2)\Big], \qquad (42)
\end{aligned}
$$

де в (40)-(42) $G^{ff(c)}(q_2)$, $G^{mm}(q_2)$ та $G^{mf}(q_2)$ визначаються співвідношеннями (32)-(34) відповідно.

Для скорочення викладок ми скористалися згаданою вище умовою послідовності потенціалу. Знайдені фур'є-образи екранованих потенціалів дозволяють шляхом оберненого перетворення Фур'є знайти оригінали цих функцій.

5. Оригінали екранованих потенціалів

Для знаходження оригіналів екранованих потенціалів здійснимо в (37) - (41) зворотнє фур'є-перетворення по змінних q_1, q_2 та проекції вектора $\vec{k}_1-\vec{k}_2$ на площину XOY - вектору $\vec{p}$

$$
\begin{aligned}
G^{\alpha\beta}(s_{12},z_1,z_2) \quad = \quad & \frac{1}{(2\pi)^4}\int d\vec{p}\int_{-\infty}^{\infty}dq_1\int_{-\infty}^{\infty}dq_2 \times \qquad (43)\\
\times \quad & e^{-i\vec{p}\vec{s}_{12}-iq_1z_1-iq_2z_2}\Big[\tilde{G}_+^{\alpha\beta}(q_1,q_2)-\tilde{G}_-^{\alpha\beta}(q_1,q_2)\Big]
\end{aligned}
$$

Нагадаємо, що фур'є-образи екранованих потенціалів залежать від модуля вектора $\vec{p}$, як від параметра. Окрім цього, функції $\tilde{G}_+^{\alpha\beta}(q_1.q_2)$ та $G_-^{\alpha\beta}(q_1,q_2)$ - аналітичні відповідно у верхній та нижній комплексних напівплощинах, що дає:

$$
\int\limits_{-\infty}^{\infty} dq_1 e^{-iq_1z_1}\tilde{G}_-^{\alpha\beta}(q_1,q_2)=0, \quad z_1>0
$$

і

$$
\int\limits_{-\infty}^{\infty} dq_1 e^{-iq_1z_1}\tilde{G}_+^{\alpha\beta}(q_1,q_2)=0, \quad z_1<0.
$$

Розрахунок інтегралів по змінних q_1 та q_2 легко виконуються за допомогою теорії лишків. При розрахунку двократного інтеграла по змінних $\vec{p}$ слід перейти до полярних координат та врахувати [9]

$$
J_0(ps_{12})=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}d\varphi e^{-ips_{12}\cos\varphi}, \qquad (44)
$$

де $J_0(x)$ - функція Бесселя I-го роду.

Результат зворотнього перетворення Фур'є для (37) і (38) має вигляд:

$$
\begin{aligned}
G_{++}^{mm}(s_{12},z_1,z_2) \quad = \quad & G_{++}^{mm(bulk)}(s_{12},|z_1-z_2|) - \\
- \quad & \frac{1}{T}\int_0^{\infty}pdpJ_0(ps_{12})e^{-\alpha_+^m(p)|z_1+z_2|} \times \\
\times \quad & \left[\frac{2}{\varepsilon_+^m\alpha_+^m(p)+\varepsilon_-^m\alpha_-^m(p)}-\frac{1}{\varepsilon_+^m\alpha_+^m(p)}\right],
\end{aligned}
$$

$$(z_1, z_2 \geq 0),$$

$$\begin{aligned}
G^{mm}_{+-}(s_{12}, z_1, z_2) &= -\frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})e^{-\alpha^m_+(p)|z_1|-\alpha^m_-(p)|z_2|} \times \\
&\times \frac{2}{\varepsilon^m_+\alpha^m_+(p)+\varepsilon^m_-\alpha^m_-(p)}, \quad (z_1 > 0, z_2 < 0), \\
G^{mm}_{-+}(s_{12}, z_1, z_2 &= G^{mm}_{+-}(s_{12}, z_2, z_1), \quad (z_1 \leq 0, z_2 \geq 0), \\
G^{mm}_{--}(s_{12}, z_1, z_2) &= G^{mm(bulk)}_{--}(s_{12}, |z_1 - z_2|) \\
&- \frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})e^{-\alpha^m_-(p)|z_1+z_2|} \times \\
&\times \left[\frac{2}{\varepsilon^m_+\alpha^m_+(p)+\varepsilon^m_-\alpha^m_-(p)} - \frac{1}{\varepsilon^m_-\alpha^m_-(p)}\right], \\
&\qquad (z_1, z_2 < 0).
\end{aligned} \tag{45}$$

Нижні індексни в (45) вказують на області простору, в яких знаходяться частинки, "+" відповідає верхній, "−" - нижній частині простору.$G^{mm(bulk)}_{++}(s_{12}, |z_1 - z_2|)$ та $G^{mm(bulk)}_{--}(s_{12}, |z_1 - z_2|)$ - об'ємні значення потенціалу екранованої взаємодії частинок пористого середовища відповідно у верхньому та нижньому напівпросторах

$$G^{mm(bulk)}_{\gamma\gamma}(s_{12}, |z_1 - z_2|) = -\frac{1}{T\varepsilon^m_\gamma}\frac{e^{-\frac{\kappa^m_\gamma}{\sqrt{\varepsilon^m_\gamma}}R_{12}}}{R_{12}}. \tag{46}$$

Тут γ позначає індекс "+" або "−", а $R_{12} = \sqrt{s^2_{12} + (z_1 - z_2)^2}$ - відстань між частинками.

Таким чином, залежно від того, в яких частинах простору знаходяться частинки пористого середовища, потенціал екранованої взаємодії прийме одне з чотирьохзначень:

$$G^{mm}(s_{12}, z_1, z_2) = \begin{cases} G^{mm}_{++}(s_{12}, z_1, z_2), & z_1, z_2 \geq 0, \\ G^{mm}_{+-}(s_{12}, z_1, z_2), & z_1 \geq 0, z_2 \leq 0, \\ G^{mm}_{-+}(s_{12}, z_1, z_2), & z_1 \leq 0, z_2 \geq 0, \\ G^{mm}_{--}(s_{12}, z_1, z_2), & z_1, z_2 \leq 0. \end{cases} \tag{47}$$

Співвідношення (47) справедливе для всіх екранованих потенціалів системи, тому далі визначатимемо лише вигляд екранованих потенціалів, для конкретних положень частинок.

Аналогічні вирази з точністю до заміни індекса m на f отримано для зв'язної частини потенціалу екранованої взаємодії між частин-

ками рідинних середовищ

$$\begin{aligned}
G^{ff(c)}_{++}(s_{12}, z_1, z_2) &= G^{ff(c)(bulk)}_{++}(s_{12}, |z_1 - z_2|) - \\
&- \frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})e^{-\alpha^f_+(p)|z_1+z_2|} \times \\
&\times \left[\frac{2}{\varepsilon^f_+\alpha^f_+(p)+\varepsilon^f_-\alpha^f_-(p)} - \frac{1}{\varepsilon^f_+\alpha^f_+(p)}\right], \\
&\qquad (z_1, z_2 \geq 0), \\
G^{ff(c)}_{+-}(s_{12}, z_1, z_2) &= -\frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})e^{-\alpha^f_+(p)|z_1|+\alpha^f_-(p)|z_2|} \times \\
&\times \frac{2}{\varepsilon^f_+\alpha^f_+(p)+\varepsilon^f_-\alpha^f_-(p)}, \quad (z_1 \geq 0, z_2 \leq 0), \\
G^{ff(c)}_{-+}(s_{12}, z_1, z_2) &= G^{ff(c)}_{+-}(s_{12}, z_2, z_1), \quad (z_1 \leq 0, z_2 \geq 0), \\
G^{ff(c)}_{--}(s_{12}, z_1, z_2) &= G^{ff(c)(bulk)}_{--}(s_{12}, |z_1 - z_2|) - \\
&- \frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})e^{-\alpha^f_-(p)|z_1+z_2|} \times \\
&\times \left[\frac{2}{\varepsilon^f_+\alpha^f_+(p)+\varepsilon^f_-\alpha^f_-(p)} - \frac{1}{\varepsilon^f_-\alpha^f_-(p)}\right], \\
&\qquad (z_1, z_2 \leq 0),
\end{aligned} \tag{48}$$

де об'ємні частини потенціалу рівні:

$$G^{ff(c)(bulk)}_{\gamma\gamma}(s_{12}, |z_1 - z_2|) = -\frac{1}{T\varepsilon^f_\gamma}\frac{e^{-\frac{\kappa^f_\gamma R_{12}}{\sqrt{\varepsilon^f_\gamma}}}}{R_{12}} \tag{49}$$

Відмітимо, що результати (45) - (48) повністю співпадають з отриманими раніше в роботах [10,11,6] екранованими потенціалами двофазної іон-дипольної системи точкових частинок. Оскільки [9]

$$\frac{e^{-\frac{\kappa R_{12}}{\sqrt{\varepsilon}}}}{\varepsilon R_{12}} = \int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})e^{-\sqrt{p^2+\kappa^2/\varepsilon}\cdot|z_1-z_2|} \cdot \frac{1}{\varepsilon\sqrt{p^2+\kappa^2/\varepsilon}}, \tag{50}$$

та підінтегральні множники в екранованих потенціалах G^{mm}_{+-}, G^{mm}_{-+} та $G^{ff(c)}_{+-}$, $G^{ff(c)}_{-+}$, які мають згідно (45),(48) вигляд $2/(\varepsilon_+\alpha_+(p) +$

$\varepsilon_-\alpha_-(p)$), слід розглядати, як середнє значення параметра іон-дипольного екранування пористого та рідинного середовищ відповідно. Звідси видно, що ефекти екранування сил електростатичного відображення, які мають місце в екранованих потенціалах $G^{mm}_{\gamma\gamma}$ та $G^{ff(c)}_{\gamma\gamma}$ (γ="+" або "−"), зумовлені відхиленням середнього значення параметра іон-дипольного екранування від його об'ємного значення в даній частині простору.

Як і в об'ємному випадку екранована взаємодія між частинками матриць пористого середовища є ізольованою від рідинного середовища. Такою ж ізольованою від частинок пористих матриць є зв'язна частина потенціалу екранованої взаємодії між частинками рідинних середовищ.

Екрановані потенціали взаємодії між частинками пористого та рідинного середовищ, а також заморожена частина екранованої взаємодії між частинками рідини мають складнішу функціональну залежність від координат. Так потенціал екранованої взаємодії між частинками пористої матриці та рідини для скорочення запису представимо у вигляді

$$\begin{aligned}
G^{mf}_{\gamma\gamma}(s_{12},z_1,z_2) &= G^{mf(bulk)}_{++}(s_{12},|z_1-z_2|)+\frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})\times\\
&\times \Big\{K^{mf}_{\gamma\gamma}(\alpha^m_\gamma,\alpha^m_\gamma)e^{-\alpha^m_\gamma(p)|z_1+z_2|}+\\
&+ K^{mf}_{\gamma\gamma}(\alpha^m_\gamma,\alpha^f_\gamma)e^{-\alpha^m_\gamma(p)|z_1|-\alpha^f_\gamma(p)|z_2|}+\\
&+ K^{mf}_{\gamma\gamma}(\alpha^f_\gamma,\alpha^m_\gamma)e^{-\alpha^f_\gamma(p)|z_1|-\alpha^m_\gamma(p)|z_2|}+\\
&+ K^{mf}_{\gamma\gamma}(\alpha^f_\gamma,\alpha^f_\gamma)e^{-\alpha^f_\gamma(p)|z_1+z_2|}\Big\},\\
&\left(\begin{array}{ll}\gamma=\text{"}+\text{"}, & z_1,z_2\geq 0\\ \gamma=\text{"}-\text{"}, & z_1,z_2\leq 0\end{array},\right)\\
G^{mf}_{\beta\gamma}(s_{12},z_1,z_2) &= \frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})\times\\
&\times \Big\{K^{mf}_{\beta\gamma}(\alpha^m_\beta,\alpha^m_\gamma)e^{-\alpha^m_\beta(p)|z_1|-\alpha^m_\gamma(p)|z_2|}+\\
&+ K^{mf}_{\beta\gamma}(\alpha^m_\beta,\alpha^f_\gamma)e^{-\alpha^m_\beta(p)|z_1|-\alpha^f_\gamma(p)|z_1|}+\\
&+ K^{mf}_{\beta\gamma}(\alpha^f_\beta,\alpha^m_\gamma)e^{-\alpha^f_\beta(p)|z_1|-\alpha^m_\gamma(p)|z_2|}+\\
&+ K^{mf}_{\beta\gamma}(\alpha^f_\beta,\alpha^f_\gamma)e^{-\alpha^f_\beta(p)|z_1|-\alpha^f_\gamma(p)|z_2|}\Big\},\\
&\left(\begin{array}{l}\beta=\text{"}+\text{"},\gamma=\text{"}-\text{"},z_1\geq 0,z_2\leq 0\\ \beta=\text{"}-\text{"},\gamma=\text{"}+\text{"},z_1\leq 0,z_2\geq 0\end{array}\right).
\end{aligned}\tag{51}$$

Явний вигляд для функцій $G^{mf(bulk)}_{++}$,$G^{mf(bulk)}_{--}$ та коефіцієнтів при експонентахприведено в Додатку. Там же приведено вигляд для функційG$^{fm(bulk)}_{++}$,$G^{fm(bulk)}_{--}$ та коефіцієнтів при експонентах,які визначають екрановану взаємодію між частинками рідинного і пористогосередовищ. Цей екранований потенціал визначається з (51) шляхомзаміни індексів m на f і навпаки.

Аналогічно до (51) приведено вигляд для замороженої частини потенціалу екранованої взаємодії між частинками рідинних середовищ.

$$\begin{aligned}
G^{ff'}_{\gamma\gamma}(s_{12},z_1,z_2) &= G^{ff'(bulk)}_{\gamma\gamma}(s_{12},|z_1-z_2|)+\frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})\times\\
&\times \Big\{K^{ff'}_{\gamma\gamma}(\alpha^m_\gamma,\alpha^m_\gamma)e^{-\alpha^m_\gamma(p)|z_1+z_2|}+\\
&+ K^{ff'}_{\gamma\gamma}(\alpha^m_\gamma,\alpha^f_\gamma)e^{-\alpha^m_\gamma(p)|z_1|-\alpha^f_\gamma(p)|z_2|}+\\
&+ K^{ff'}_{\gamma\gamma}(\alpha^f_\gamma,\alpha^m_\gamma)e^{-\alpha^f_\gamma(p)|z_1|-\alpha^m_\gamma(p)|z_2|}+\\
&+ K^{ff'}_{\gamma\gamma}(\alpha^f_\gamma,\alpha^f_\gamma)e^{-\alpha^f_\gamma(p)|z_1|-\alpha^f_\gamma(p)|z_2|}\Big\},\\
&\left(\begin{array}{l}\gamma=\text{"}+\text{"},z_1,z_2\geq 0\\ \gamma=\text{"}-\text{"},z_1,z_2\leq 0\end{array}\right),\\
G^{ff'}_{\beta\gamma}(s_{12},z_1,z_2) &= \frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})\times\\
&\times \Big\{K^{ff'}_{\beta\gamma}(\alpha^m_\beta,\alpha^m_\gamma)e^{-\alpha^m_\beta(p)|z_1|-\alpha^m_\gamma(p)|z_2|}+\\
&+ K^{ff'}_{\beta\gamma}(\alpha^m_\beta,\alpha^f_\gamma)e^{-\alpha^m_\beta(p)|z_1|-\alpha^f_\gamma(p)|z_2|}+\\
&+ K^{ff'}_{\beta\gamma}(\alpha^f_\beta,\alpha^m_\gamma)e^{-\alpha^f_\beta(p)|z_1|-\alpha^m_\gamma(p)|z_2|}+\\
&+ K^{ff'}_{\beta\gamma}(\alpha^f_\beta,\alpha^{f'}_\gamma)e^{-\alpha^f_\beta(p)|z_1|-\alpha^f_\gamma(p)|z_2|}\Big\},\\
&\left(\begin{array}{l}\beta=\text{"}+\text{"},\gamma=\text{"}-\text{"},z_1\geq 0,z_2\leq 0\\ \beta=\text{"}-\text{"},\gamma=\text{"}+\text{"},z_1\leq 0,z_2\geq 0\end{array}\right),
\end{aligned}\tag{52}$$

де явний вигляд необхідних для розрахунку функцій приведено в Додатку.

Повний екранований потенціал взаємодії частинок рідинних середовищ складається згідно з (3) із суми зв'язної та замороженої частин. Тому

$$G^{ff}(s_{12},z_1,z_2)=G^{ff(c)}(s_{12},z_1,z_2)+G^{ff'}(s_{12},z_1,z_2). \tag{53}$$

Вирази (48) та (52) дозволяють визначити повний екранований потенціал частинок рідинного середовища, коли вони знаходяться в довільних частинах простору.

6. Одночастинкові екрановані потенціали

Для просторово-неоднорідної системи окрім двочастинкових екранованих потенціалів характерними є також одночастинкові потенціали. Вони разом з двочастинковими дозволяють визначити структурні та термодинамічні властивості системи, одночастинкові екрановані потенціали описують взаємодію частинок кожної з фаз з поверхнею поділу і залежать від розташування частинок по відношенню до неї. Знання цих потенціалів дозволяє оцінити характер сили, яка діє на частинку з боку поверхні поділу, залежність її від фізичних властивостей контактуючих середовищ. Це дає можливість дослідити наявність позитивної чи негативної адсорбції зумовленої електростатичними взаємодіями.

Фур'є-образ одночастинкового потенціалу складається з недіагональних елементів матриці утвореної з фур'є-образу двочастинкового екранововоного потенціалу [12]

$$\tilde{G}^s(q_1,q_2) = [1-\delta(q_1+q_2)]\tilde{G}(q_1,q_2), \tag{54}$$

де $\tilde{G}^s(q_1,q_2)$ - фур'є-образ одночастинкового, а $\tilde{G}(q_1,q_2)$ - двочастинкового екранованих потенціалів.

Як показано в праці [7], одночастинкові потенціали можуть бути отримані з парних шляхом формального розгляду екранованої взаємодії частинки з собою, коли з цієї взаємодії виключити власноенергетичні члени, які містяться в однорідних частинах екранованих потенціалів. Для нашої системи є два типи одночастинкових потенціалів: одночастинкові потенціали для частинок пористої матриці та частинок рідинного середовища. Враховуючи (54) та (37) для одночастинкового екранованого потенціалу частинок пористого середовища маємо:

$$\begin{aligned} G^m_\gamma(z_1) &= -\frac{1}{T}\int_0^\infty pdp e^{-2\alpha^m_\gamma(p)|z_1|} \\ &\times \left[\frac{2}{\varepsilon^m_+\alpha^m_+(p)+\varepsilon^m_-\alpha^m_-(p)} - \frac{1}{\varepsilon^m_\gamma\alpha^m_\gamma(p)}\right] \\ &\left(\begin{array}{ll} \gamma = "+", & z_1\ge 0 \\ \gamma = "-", & z_1 \le 0 \end{array}\right) \end{aligned} \tag{55}$$

Для частинок рідинного середовища подібно, як для двочастинкового потенціалу можна розглядати зв'язну та заморожену частини. Зв'язну частину подібно до(48) можна отримати з (55) шляхом заміни індекса "m" на"f".

$$\begin{aligned} G^{f(c)}_\gamma(z_1) &= -\frac{1}{T}\int_0^\infty pdp e^{-2\alpha^f_\gamma(p)|z_1|} \times \\ &\times \left[\frac{2}{\varepsilon^f_+\alpha^f_+(p)+\varepsilon^f_-\alpha^f_-(p)} - \frac{1}{\varepsilon^f_\gamma\alpha^f_\gamma(p)}\right], \\ &\left(\begin{array}{ll} \gamma = "+", & z_1\ge 0 \\ \gamma = "-", & z_1 \le 0 \end{array}\right). \end{aligned} \tag{56}$$

Заморожена складова одночастинкового потенціалу отримується з першої рівності (52), покладаючи в ній $s_{12}=0$, $z_1=z_2$ та нехтуючи об'ємною частиною потенціалу. Тоді

$$\begin{aligned} G^{f(b)}_\gamma(z_1) &= \frac{1}{T}\int_0^\infty pdp \left\{K^{ff'}_{\gamma\gamma}(\alpha^m_\gamma,\alpha^m_\gamma)e^{-2\alpha^m_\gamma|z_1|}+\right. \\ &+ \left[K^{ff'}_{\gamma\gamma}(\alpha^m_\gamma,\alpha^f_\gamma)+K^{ff'}_{\gamma\gamma}(\alpha^f_\gamma,\alpha^m_\gamma)\right]e^{-[\alpha^m_\gamma(p)+\alpha^f_\gamma(p)]|z_1|}+ \\ &+ \left.K^{ff'}_{\gamma\gamma}(\alpha^f_\gamma,\alpha^f_\gamma)e^{-2\alpha^f_\gamma(p)|z_1|}\right\}, \\ &\left(\begin{array}{ll} \gamma = "+", & z_1\ge 0 \\ \gamma = "-", & z_1 \le 0 \end{array}\right). \end{aligned} \tag{57}$$

Тоді повний одночастинковий потенціал рідинного середовища має вигляд

$$\begin{aligned} &G^f_\gamma(z_1) = G^{f(c)}_\gamma(z_1) + G^{f(b)}_\gamma(z_1) = \\ &= \frac{1}{T}\int_0^\infty pdp\left\{K^{ff'}(\alpha^m_\gamma,\alpha^m_\gamma)e^{-2\alpha^m_\gamma|z_1|}+\right. \\ &+ \left[K^{ff'}_\gamma(\alpha^m_\gamma,\alpha^f_\gamma)+K^{ff'}_\gamma(\alpha^f_\gamma,\alpha^m_\gamma)\right]e^{-[\alpha^m_\gamma(p)+\alpha^f_\gamma(p)]|z_1|}+ \\ &+ \left.\left[K^{ff'}_{\gamma\gamma}(\alpha^f_\gamma,\alpha^f_\gamma)+\frac{1}{\varepsilon^f_\gamma\alpha^f_\gamma(p)} - \frac{2}{\varepsilon^f_+\alpha^f_+(p)+\varepsilon^f_-\alpha^f_-(p)}\right]e^{-2\alpha^f_\gamma(p)|z_1|}\right\}, \\ &\left(\begin{array}{ll} \gamma = "+", & z_1\ge 0 \\ \gamma = "-", & z_1 \le 0 \end{array}\right). \end{aligned} \tag{58}$$

Характерною особливістю рідинного одночастинкового потенціалу є те, що подібно як і для двочастинкового, вклад в нього вносять як пориста, так і рідинна підсистеми.

Відмітимо, що для $G^{mf}(s_{12},z_1,z_2)$ не існує відповідного одночастинкового екранованого потенціалу, оскільки цей парний потенціал описує взаємодію між двома частинками, які належать до двох різних підсистем і не можуть бути ототожненими.

7. Асимптотична поведінка екранованих потенціалів на великих віддалях та деякі часткові випадки екранування в пористих середовищах

Отримані в попередньому параграфі загальні вирази для екранованих потенціалів дозволять дослідити ряд часткових випадків. При граничному розведенні концентрація іонів в рідинному та пористому середовищах нескінченно мала. За відсутності іонної підсистеми взаємодія між двома частинками екранується лише дипольними підсистемами. Вирази для екранованих потенціалів значно спрощуються. Для екранованої взаємодії між частинками пористого середовища має вигляд аналогічний, як і у класичному випадку взаємодії двох заряджених частинок у системі контактуючих двох діелектричних середовищ

$$\begin{aligned}
G^{mm}_{++}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{1}{\varepsilon^m_+}\frac{1}{R_{12}} - \left(\frac{2}{\varepsilon^m_+ + \varepsilon^m_-} - \frac{1}{\varepsilon^m_+}\right)\frac{1}{R^{im}_{12}},\\
G^{mm}_{+-}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{2}{\varepsilon^m_+ + \varepsilon^m_-}\frac{1}{R_{12}},\\
G^{mm}_{-+}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{2}{\varepsilon^m_+ + \varepsilon^m_-}\frac{1}{R_{12}},\\
G^{mm}_{--}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{1}{\varepsilon^m_-}\frac{1}{R_{12}} - \left(\frac{2}{\varepsilon^m_+ + \varepsilon^m_-} - \frac{1}{\varepsilon^m_-}\right)\frac{1}{R^{im}_{12}}. \qquad (59)
\end{aligned}$$

Для зв'язної частини екранованого потенціалу взаємодії між частинками рідинного середовища отримаємо подібний вираз, який відрізняється від (59) заміною індекса m на f.

$$\begin{aligned}
G^{ff(c)}_{++}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{1}{\varepsilon^f_+}\frac{1}{R_{12}} - \left(\frac{2}{\varepsilon^f_+ + \varepsilon^f_-} - \frac{1}{\varepsilon^f_+}\right)\frac{1}{R^{im}_{12}},\\
G^{ff(c)}_{+-}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{2}{\varepsilon^f_+ + \varepsilon^f_-}\frac{1}{R_{12}},\\
G^{ff(c)}_{-+}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{2}{\varepsilon^f_+ + \varepsilon^f_-}\frac{1}{R_{12}},\\
G^{ff(c)}_{--}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{1}{\varepsilon^f_-}\frac{1}{R_{12}} - \left(\frac{2}{\varepsilon^f_+ + \varepsilon^f_-} - \frac{1}{\varepsilon^f_-}\right)\frac{1}{R^{im}_{12}}, \qquad (60)
\end{aligned}$$

де в (59) та (60) $R^{im} = \sqrt{s^2_{12} + (z_1 + z_2)^2}$ позначає відстань між частинкою та її відображенням відносно площини поділу діелектричних середовищ.

Ефекти відображень присутні і у взаємодії між частинками пористого та рідинного середовищ. В цьому випадку екрановані потенціали мають вигляд:

$$\begin{aligned}
G^{mf}_{++}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{1}{\varepsilon^m_+\varepsilon^f_+}\frac{1}{R_{12}} -\\
&- \left(\frac{4}{(\varepsilon^m_+ + \varepsilon^m_-)(\varepsilon^f_+ + \varepsilon^f_-)} - \frac{1}{\varepsilon^m_+\varepsilon^f_+}\right)\frac{1}{R^{im}_{12}},\\
G^{mf}_{+-}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{4}{(\varepsilon^m_+ + \varepsilon^m_-)(\varepsilon^f_+ + \varepsilon^f_-)}\frac{1}{R_{12}},\\
G^{mf}_{-+}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{4}{(\varepsilon^m_+ + \varepsilon^m_-)(\varepsilon^f_+ + \varepsilon^f_-)}\frac{1}{R_{12}},\\
G^{mf}_{--}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{1}{\varepsilon^m_-\varepsilon^f_-}\frac{1}{R_{12}} -\\
&- \left(\frac{4}{(\varepsilon^m_+ + \varepsilon^m_-)(\varepsilon^f_+ + \varepsilon^f_-)} - \frac{1}{\varepsilon^m_-\varepsilon^f_-}\right)\frac{1}{R^{im}_{12}}. \qquad (61)
\end{aligned}$$

Для повної екранованої взаємодії між частинками рідинного середовища у випадку безмежного розведення отримаємо:

$$\begin{aligned}
G^{ff}_{++}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{1}{\varepsilon^{eff}_+}\frac{1}{R_{12}} - \left(\frac{1}{\varepsilon^{eff}} - \frac{1}{\varepsilon^{eff}_+}\right)\frac{1}{R^{im}_{12}},\\
G^{ff}_{+-}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{1}{\varepsilon_{eff}R_{12}},\\
G^{ff}_{-+}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{1}{\varepsilon_{eff}R_{12}},\\
G^{ff}_{--}(s_{12},z_1,z_2) &= -\frac{1}{\varepsilon^{eff}_-}\frac{1}{R_{12}} - \left(\frac{1}{\varepsilon_{eff}} - \frac{1}{\varepsilon^{eff}_-}\right)\frac{1}{R^{im}}, \qquad (62)
\end{aligned}$$

де ефективні діелектричні сталі рівні

$$\frac{1}{\varepsilon^{eff}_\pm} = \frac{1}{\varepsilon^f_\pm} - \left(1 - \frac{1}{\varepsilon^m_\pm}\right)\cdot\frac{1}{(\varepsilon^f_\pm)^2},$$

$$\frac{1}{\varepsilon^{eff}} = \frac{2}{\varepsilon_+^f+\varepsilon_-^f} - \left(1-\frac{2}{\varepsilon_+^m+\varepsilon_-^m}\right)\cdot\left(\frac{2}{\varepsilon_+^f+\varepsilon_-^f}\right)^2. \quad (63)$$

Значення $\varepsilon_{\pm}^{eff}$ співпадають з виразом для ефективної діелектричної сталої, отриманим в [4] у випадку просторово однорідної системи. В просторово неоднорідній системі крім цих двох ефективних діелектричних сталих, які відповідають об'ємним значенням ефективних діелектричних сталих верхнього та нижнього середовищ, виникає додатково просторово неоднорідна ефективна діелектрична стала ε^{eff}. Вона формально співпадає з виразом для об'ємного стачення ефективної діелектричної сталої, якщо в нього підставити середні значення пористого та рідинного середовищ (відповідно $\frac{1}{2}(\varepsilon_+^m+\varepsilon_-^m)$ та $\frac{1}{2}(\varepsilon_+^f+\varepsilon_-^f)$). Відмітимо, що у випадку $1/\varepsilon_+^{eff}>0$ маємо позитивну, а в протилежному випадку негативну адсорбцію. Аналогічне твердження справедливе для взаємодіючих частинок нижнього середовища. При однакових ефективних діелектричних сталих

$$\varepsilon_+^{eff}=\varepsilon_-^{eff} \quad (64)$$

взаємодіюча пара частинок верхнього чи нижнього середовищ відчувають збоку поверхні однакового характеру адсорбію (або позитивну, або негативну), оскільки

$$\frac{1}{\varepsilon^{eff}}-\frac{1}{\varepsilon_+^{eff}}=\frac{1}{\varepsilon^{eff}}-\frac{1}{\varepsilon_-^{eff}}. \quad (65)$$

Така ситуація є неможливою для іон-дипольних систем при відсутності пористого середовища [6,7]. Рівність (64) пов'язує між собою діелектричні проникливості і дозволяє визначити одну з них через три інші. Співвідношення (64) можна переписати у вигляді

$$\frac{1}{(\varepsilon_-^f)^2}\frac{1}{\varepsilon_-^m}=\frac{1}{(\varepsilon_+^f)^2}\frac{1}{\varepsilon_+^m}+\frac{1}{\varepsilon_+^f}\left(1-\frac{1}{\varepsilon_+^f}\right)-\frac{1}{\varepsilon_-^f}\left(1-\frac{1}{\varepsilon_-^f}\right). \quad (66)$$

При співпадінні ефективних діелектричних сталих верхнього та нижнього напівпросторів з просторово неоднорідною ефективною діелектричною сталою

$$\frac{1}{\varepsilon_+^{eff}}=\frac{1}{\varepsilon_-^{eff}}=\frac{1}{\varepsilon^{eff}} \quad (67)$$

взаємодіючі частинки рідинного середовища нескінченно розведеної системи перестають відчувати вплив просторової неоднорідності

і взаємодіють між собою за допомогою кулонівських потенціалів. Слід відмітити, що рівності (67) та (65) повинні задовільнятися в області фізично допустимих значень діелектричних сталих, тобто:

$$\varepsilon_{\pm}^m\geq 1, \qquad \varepsilon_{\pm}^f\geq 1. \quad (68)$$

Приведені вище зауваження стосуються взаємодії між частинками рідинного середовища нескінченно розведеної системи. Подібні висновки можна зробити і для взаємодії частинок пористого та рідинного середовищ. При цьому рівність (66) згідно (61) матиме вигляд:

$$\varepsilon_-^m\varepsilon_-^f=\varepsilon_+^m\varepsilon_+^f, \quad (69)$$

а рівності (67) виконуватимуться лише коли

$$\varepsilon_+^f=\varepsilon_-^f, \quad (70)$$

що відповідає просторово однорідному випадку.

Отже для взаємодії частинок пористого і рідинного середовища розведеної системи ефект однакової адсорбції спостерігається при умові 67),а ефект зникнення впливу просторової неоднорідності на взаємодію можливий лише для просторово однорідної системи, коли $\varepsilon_+^f=\varepsilon_-^f$ та $\varepsilon_+^m=\varepsilon_-^m$.

Важливим є дослідження асимптотичної поведінки парних міжчастинкових кореляцій поблизу поверхні поділу фаз.

В [13,14,7] було показано, що для двофазної іон-дипольної системи з плоскою поверхнею поділу фаз поздовжні парні кореляції спадають із зростанням віддалі між частинками за степеневим законом. Так міжіонні кореляції загасають, як $(1/R_{12})^3$. Така поведінка міжчастинкових кореляцій можлива лише тоді, коли в одному з напівпросторів відсутня іонна підсистема. Повільне спадання кореляцій відповідає правилам сум для просторово неоднорідної системи і є тестом на коректність отриманих результатів [14]. З математичної точки зору поява таких кореляцій зв'язана з виникненням парних степенів у розкладах в ряд Тейлора по змінній p в околі точки $p_0=0$ підінтегральних виразів типу (45), (48) без функцій Бесселя [14]. Такі степені з'являються, коли концентрація іонів в одному з напівпросторів стає рівною нулеві. Отже, якщо в нашій системі в одному з напівпросторів, наприклад нижньому, в пористому (або рідинному) середовищі концентрація іонів рівна нулеві, то парні міжіонні кореляції в площинах паралельних межі поділу будуть спадати з віддаллю, як $(1/R_{12})^3$. Таке загасання має місце у випадку, коли концентрація іонів у рідинному середовищі відмінна від нуля як в нижній, так і верхній фазах, але для пористого середовища концентрація іонів в нижньому напівпросторі рівна нулеві.

Для прикладу в даній роботі досліджено асимптотичну поведінку системи, в якійконцентрація іонів відмінна від нуля тільки для верхньої фази рідинного середовища. На великих віддалях паралельно межі поділу кореляції загасають наступним чином:

$$
\begin{aligned}
G^{mm}(s_{12}, z_1, z_2) &\quad \overrightarrow{s_{12} \to \infty} \quad -\frac{2}{\varepsilon_+^m + \varepsilon_-^m} \frac{1}{s_{12}} \\
G^{mf}_{\alpha\beta}(s_{12}, z_1, z_2) &\quad \overrightarrow{s_{12} \to \infty} \quad A^{mf}_{\alpha\beta} \frac{1}{s_{12}^3} \\
G^{ff}_{\alpha\beta}(s_{12}, z_1, z_2) &\quad \overrightarrow{s_{12} \to \infty} \quad A^{ff}_{\alpha\beta} \frac{1}{s_{12}^3},
\end{aligned} \qquad (71)
$$

де: $\alpha = " + "$ або $" - "$; $\beta = " + "$ або $" - "$.

Вигляд коефіцієнтів в асимптотиках (69) приведено в Додатку.

Оскільки концентрація іонів у пористому середовищі рівна нулеві у всьому просторі, то аимптотична поведінка міжіонних кореляцій на великих віддалях визначається з (59) і обернено пропорційна віддалі між частинками. Два останні вирази в (69) характерні і для інших систем із степеневим затуханням міжчастинкових кореляцій. У випадку іон-дипольних чи диполь-дипольних кореляцій асимптотики спадатимуть з віддаллю, як $1/R_{12}^4$ та $1/R_{12}^5$ відповідно.

Одночастинкові кореляції подібно, як у для двохфазної іондипольної системи експонентно спадають з віддаллю до поверхні поділу, якщо в даній частині простору концентрація іонів для даного середовища (пористого чи рідинного) відмінна від нуля. Коли іонна концентрація рівна нулеві, асимптотики одночастинкових екранованих потенціалів стають обернено пропорційні до віддалі.

Так для досліджуваної системи з відмінною від нуля іонною концентрацією рідинного середовища у верхньому напівпросторі асимптотика іонного одночастинкового екранованого потенціалу пористого середовища відповідно до (59) має вигляд:

$$
\begin{aligned}
G^m_+(z_1) &\quad \overrightarrow{z_1 \to \infty} \quad -\frac{1}{\varepsilon_+^m} \frac{\varepsilon_+^m - \varepsilon_-^m}{\varepsilon_+^m + \varepsilon_-^m} \frac{1}{2z_1} \\
G^m_-(z_1) &\quad \overrightarrow{s_{12} \to -\infty} \quad \frac{1}{\varepsilon_-^m} \frac{\varepsilon_+^m - \varepsilon_-^m}{\varepsilon_+^m + \varepsilon_-^m} \frac{1}{2|z_1|}
\end{aligned} \qquad (72)
$$

Для асимптотик одночастинкового екранованого потенціалу рідинного середовища отримаємо наступні вирази:

$$
\begin{aligned}
G^f_+(z_1) &\quad \overrightarrow{z_1 \to \infty} \quad -\left[1 + \frac{1}{\varepsilon_+^f} \frac{\varepsilon_+^m - 1}{\varepsilon_+^m} \left(\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}} z_1 - 1 \right)\right] \times \\
&\qquad \times \frac{e^{-2\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}} z_1}}{2\varepsilon_+^f z_1}, \\
G^f_-(z_1) &\quad \overrightarrow{z_1 \to -\infty} \quad -\left(1 - \frac{1}{\varepsilon_-^f} \frac{\varepsilon_-^m - 1}{\varepsilon_-^m}\right) \frac{1}{2\varepsilon_-^f |z_1|}.
\end{aligned} \qquad (73)
$$

Характер асимптотик (73) залишається таким, як у випадку іондипольної системи при відсутності пористого середовища [7,14], тобто незалежно від діелектричних властивостей контактуючих середовищ далеко від поверхні поділу частинки відчувають притягувальну дію.

8. Висновки.

Дослідження ефектів екранування електростатичних взаємодій у просторово неоднорідній системі іон-дипольної суміші і пористого середовища показало, що врахування того, що рідина і пористе середовище термодинамічно незрівноважені, приводить до якісних змін в екрануванні. По-перше, тут зберігаються ті відмінності від класичного екранування, які мають місце при застосуванні методу реплік до об'ємної системи розчину електроліту в пористому середовищі [3,4]. В просторово неоднорідному випадку екранування електростатичних взаємодій в розглянутій системі значно ускладнюється в порівнянні з двофазною іон-дипольною системою [6,7]. Екрановані потенціали функціонально нагадують екрановані потенціали просторово неоднорідної іон-молекулярної системи з врахуванням квадрупольних взаємодій [7], однак їх фур'є-образи мають складніший характер. Характерним є розбиття екранування міжчастинкової взаємодії рідинного середовища на дві частини: зв'язну, яка описує пряму екрановану взаємодію між частинками рідини, та заморожену, яка безпосередньо зв'язана з впливом термодинамічної незрівноваженості рідинного та пористого середовищ. Як показано вище, вплив замороженого пористого середовища на взаємодію іонів електроліту може суттєво змінювати адсорбційні властивості поверхні поділу. Для гранично розведених eлетролітів може виникнути (при певному підборі діелектричних властивостей середовищ) ситуація, коли іони з нижнього і верхнього напівпросторів будуть притягуватися до межі поділу фаз. Дослідження впливу пористості на адсорбційні поверхневі властивості вимагає окремого дослідження.

Екрановані потенціали просторово неоднорідної системи є неперервними функціями координат, а тому на межі поділу повинні задовільняти граничним умовам неперервності

$$
\begin{aligned}
G^{mf}_{++}(p,z_1,0) &= G^{mf}_{+-}(p,z_1,0),\\
G^{mf}_{++}(p,z_2,0) &= G^{mf}_{-+}(p,0,z_2),\\
G^{mf}_{--}(p,z_1,0) &= G^{mf}_{-+}(p,z_1,0),\\
G^{mf}_{--}(p,0,z_2) &= G^{mf}_{+-}(p,0,z_2)
\end{aligned}
$$

та аналогічним умовам для екранованої взаємодії частинок рідини, а також для частинок пористого середовища. Використовуючи приведені в Додатку вирази для коефіцієнтів при експонентах в екранованих потенціалах, а також (45) переконуємося, що отримані нами вирази для потенціалів екранованої взаємодії задовільняють граничним умовам.

Накінець зауважимо, що приведені нами функції G^{mm},G^{mf} та G^{ff} є лишетвірними для отримання самих екранованих потенціалів. Для цього необхіднозгідно (7) подіяти на них операторами узагальненогоелектростатичного заряду (6).

Додаток

Для скорочення запису введемо позначення

$$
\begin{aligned}
C^m_\pm &= \frac{(\alpha^m_\pm(p))^2-p^2}{(\alpha^f_\pm(p))^2-(\alpha^m_\pm(p))^2},\\
C^f_\pm &= \frac{(\alpha^f_\pm(p))^2-p^2}{(\alpha^f_\pm(p))^2-(\alpha^m_\pm(p))^2},
\end{aligned}
$$

де вибираємо відповідні знаки "+" чи "−". Оскільки

$$
\begin{aligned}
(\alpha^m_\pm(p))^2-p^2 &= (\kappa^m_\pm)/\varepsilon^m_\pm,\\
(\alpha^f_\pm(p))^2-p^2 &= (\kappa^f_\pm)/\varepsilon^f_\pm,
\end{aligned}
$$

то $C^m_\pm$ та $C^f_\pm$ є сталими і не залежать від змінної p

$$
\begin{aligned}
C^m_\pm &= \frac{(\kappa^m_\pm)^2/\varepsilon^m_\pm}{(\kappa^f_\pm)^2/\varepsilon^f_\pm-(\kappa^m_\pm)^2/\varepsilon^m_\pm},\\
C^f_\pm &= \frac{(\kappa^f_\pm)^2/\varepsilon^f_\pm}{(\kappa^f_\pm)^2/\varepsilon^f_\pm-(\kappa^m_\pm)^2/\varepsilon^m_\pm}. \qquad (74)
\end{aligned}
$$

Крім цього позначимо

$$
\begin{aligned}
\alpha_m(p) &= \frac{\varepsilon^m_+\alpha^m_+(p)+\varepsilon^m_-\alpha^m_-(p)}{2},\\
\alpha_f(p) &= \frac{\varepsilon^f_+\alpha^f_+(p)+\varepsilon^f_-\alpha^f_-(p)}{2}, \qquad (75)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\beta_+(p) &= \frac{\alpha^m_+(p)\alpha^f_+(p)+p^2}{\alpha^m_+(p)+\alpha^f_+(p)},\\
\beta_-(p) &= \frac{\alpha^m_-(p)\alpha^f_-(p)+p^2}{\alpha^m_-(p)+\alpha^f_-(p)}. \qquad (76)
\end{aligned}
$$

Тоді коефіцієнти при експонентах та об'ємні значення екранованих потенціалів G^{mf} матимуть вигляд:

1. $z_1 \geq 0, \quad z_2 \geq 0,$

$$
\begin{aligned}
&G^{mf(bulk)}_+(s_{12},|z_1-z_2| = \\
&= \frac{1}{\varepsilon^m_+\varepsilon^f_+}\left(C^m_+\frac{e^{-\kappa^m_+/\sqrt{\varepsilon^m_+}R_{12}}}{R_{12}} - C^f_+\frac{e^{-\kappa^f_+/\sqrt{\varepsilon^f_+}R_{12}}}{R_{12}}\right),\\
&K^{mf}(\alpha^m_+,\alpha^m_+) = \tfrac{1}{2}C^m_+\frac{1}{\varepsilon^f_+}\left(\frac{1}{\alpha_m(p)}-\frac{1}{\varepsilon^m_+\alpha^m_+(p)}\right),\\
&K^{mf}(\alpha^m_+,\alpha^f_+) = \frac{1}{2}\frac{C^f_+}{\varepsilon^m_+}\frac{1}{\alpha_f(p)} - \tfrac{1}{2}\frac{C^m_+}{\varepsilon^f_+}\frac{1}{\alpha_m(p)} - \frac{\beta_+(p)+\beta_-(p)}{4\alpha_m(p)\alpha_f(p)},\\
&K^{mf}(\alpha^f_+,\alpha^m_+) = 0,\\
&K^{mf}(\alpha^f_+,\alpha^f_+) = -\frac{1}{2}\frac{C^f_+}{\varepsilon^m_+}\left(\frac{1}{\alpha_f(p)}-\frac{1}{\varepsilon^f_+\alpha^f_+(p)}\right).
\end{aligned} \qquad (77)
$$

2. $z_1 \geq 0, \quad z_2 \leq 0,$

$$
\begin{aligned}
K^{mf}(\alpha^m_+,\alpha^m_-) &= \frac{1}{2}\frac{C^m_-}{\varepsilon^f_-}\frac{1}{\alpha_m(p)},\\
K^{mf}(\alpha^m_+,\alpha^f_-) &= \frac{1}{2}\frac{C^f_+}{\varepsilon^m_+}\frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{1}{2}\frac{C^m_-}{\varepsilon^f_-}\frac{1}{\alpha_m(p)} - \frac{\beta_+(p)+\beta_-(p)}{4\alpha_m(p)\alpha_f(p)},\\
K^{mf}(\alpha^f_+,\alpha^m_-) &= 0,\\
K^{mf}(\alpha^f_+,\alpha^f_-) &= -\frac{1}{2}\frac{C^f_+}{\varepsilon^m_+}\frac{1}{\alpha_f(p)}. \qquad (78)
\end{aligned}
$$

3. $z_1 \le 0, \quad z_2 \ge 0,$

$$
\begin{aligned}
K^{mf}(\alpha_-^m,\alpha_+^m) &= \frac{1}{2}\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\frac{1}{\alpha_m(p)},\\
K^{mf}(\alpha_-^m,\alpha_+^f) &= \frac{1}{2}\frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m}\frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{1}{2}\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\frac{1}{\alpha_m(p)} - \frac{\beta_+(p)+\beta_-(p)}{4\alpha_m(p)\alpha_f(p)},\\
K^{mf}(\alpha_-^f,\alpha_+^m) &= 0,\\
K^{mf}(\alpha_-^f,\alpha_+^f) &= -\frac{1}{2}\frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m}\frac{1}{\alpha_f(p)}.
\end{aligned} \tag{79}
$$

4. $z_1 \le 0, \quad z_2 \le 0,$

$$
\begin{aligned}
&G_-^{mf(bulk)}(s_{12},|z_1-z_2|) =\\
&= \frac{1}{\varepsilon_-^m\varepsilon_-^f}\left(C_-^m\frac{e^{-\kappa_-^m/\sqrt{\varepsilon_-^m}R_{12}}}{R_{12}} - C_-^f\frac{e^{-\kappa_-^f/\sqrt{\varepsilon_-^f}R_{12}}}{R_{12}}\right),\\
&K^{mf}(\alpha_-^m,\alpha_-^m) = \frac{1}{2}\frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f}\left[\frac{1}{\alpha_m(p)} - \frac{1}{\varepsilon_-^m\alpha_-^m(p)},\right]\\
&K^{mf}(\alpha_-^m,\alpha_-^f) = \frac{1}{2}\frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m}\frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{1}{2}\frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f}\frac{1}{\alpha_m(p)} -\\
&\qquad -\frac{\beta_+(p)+\beta_-(p)}{4\alpha_m(p)\alpha_f(p)},\\
&K^{mf}(\alpha_-^f,\alpha_-^m) = 0\\
&K^{mf}(\alpha_-^f,\alpha_-^f) = -\frac{1}{2}\frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m}\left(\frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{1}{\varepsilon_-^f\alpha_-^f(p)}.\right)
\end{aligned} \tag{80}
$$

Для екранованих потенціалів G^{fm} необхідні для їх розрахунку величини отримуються з (77-80) шляхом заміни індексів m на f і навпаки. При такій заміні знаки коефіцієнтів $C_\pm^m$ та $C_\pm^f$ згідно (74) змінюються на протилежні.

У випадку взаємодії між частинками різних реплік рідинного середовища об'ємні екрановані потенціали та коефіцієнти при експонентах рівні:

1. $z_1 \ge 0, z_2 \ge 0$

$$
\begin{aligned}
&G_+^{ff'(bulk)}(s_{12},|z_1-z_2|) =\\
&\frac{1}{(\varepsilon_+^f)^2}\left(1-\frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m}\right)\left(1-\frac{1}{2}\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}R_{12}\right)\frac{e^{-\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}R_{12}}}{R_{12}}+\\
&+\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^m(\varepsilon_+^f)^2}\left[C_+^f\frac{e^{-\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}R_{12}}}{R_{12}} - C_+^m\frac{e^{-\frac{\kappa_+^m}{\sqrt{\varepsilon_+^m}}R_{12}}}{R_{12}}\right],\\
&K^{ff'}(\alpha_+^m,\alpha_+^m) =\\
&-\frac{1}{2}\left(\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\right)^2\left(\frac{1}{\alpha_m(p)} - \frac{1}{\varepsilon_+^m\alpha_+^m(p)}\right),
\end{aligned} \tag{81}
$$

$$
\begin{aligned}
&K^{ff'}(\alpha_+^m,\alpha_+^f) = -\frac{1}{2}\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m}\frac{1}{\alpha_f(p)} + \frac{1}{2}\left(\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\right)^2\frac{1}{\alpha_m(p)}+\\
&\frac{1}{4}\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\frac{\beta_+(p)+\beta_-(p)}{\alpha_m(p)\alpha_f(p)}
\end{aligned} \tag{82}
$$

$$
K^{f'f}(\alpha_+^f,\alpha_+^m) = K^{ff'}(\alpha_+^m,\alpha_+^f)
$$

$$
\begin{aligned}
&K^{ff'}(\alpha_+^f,\alpha_+^f) =\\
&-\frac{1}{8}(C_+^f)^2\frac{(\alpha_+^f(p)-\alpha_+^m(p))^2}{\varepsilon_+^m\alpha_+^f(p)\alpha_f^2(p)} - \frac{1}{8}(C_-^f)^2\frac{(\alpha_-^f(p)-\alpha_+^m(p))^2}{\varepsilon_-^m\alpha_-^f(p)\alpha_f^2(p)}+\\
&+\frac{1}{8}\frac{(\alpha_+^f(p)+\alpha_-^f(p))(\alpha_+^f(p)\alpha_-^f(p)+p^2)}{\alpha_+^f(p)\alpha_-^f(p)\alpha_f^2(p)} - \frac{1}{8}\frac{(\beta_+(p)+\beta_-(p))^2}{\alpha_m(p)\alpha_f^2(p)}+\\
&\frac{1}{2}\frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m}\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\left(\frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{1}{\varepsilon_+^f\alpha_+^f(p)}\right) + \frac{1}{2}\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\left(\frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m}\frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\frac{1}{\alpha_m(p)}\right)-\\
&-\frac{1}{2}\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\frac{\beta_+(p)+\beta_-(p)}{\alpha_m(p)\alpha_f(p)} - \frac{1}{4}\left(1-\frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m}\right)\frac{(\alpha_+^f(p))^2+p^2}{(\alpha_+^f(p))^3(\varepsilon_+^f)^2}-\\
&-\frac{1}{4}\left(1-\frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m}\right)\left(\frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{1}{\varepsilon_+^f\alpha_+^f(p)}\right)\frac{\left(\frac{\kappa_+^f}{\varepsilon_+^f}\right)^2\cdot(z_1+z_2)}{\alpha_+^f(p)}
\end{aligned} \tag{83}
$$

2. $z_1 \geq 0, \quad z_2 \leq 0,$

$$
\begin{aligned}
&K^{ff'}(\alpha_+^m, \alpha_-^m) = \\
&-\frac{1}{2} C_+^m C_-^m \frac{1}{\varepsilon_+^f \varepsilon_-^f} \frac{1}{\alpha_m(p)} \\
&K^{ff'}(\alpha_+^m, \alpha_-^f) = \\
&-\frac{1}{2} \frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f} \frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m} \frac{1}{\alpha_f(p)} + \frac{1}{2} \frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f} \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \frac{1}{\alpha_m(p)} + \\
&+\frac{1}{4} \frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f} \frac{\beta_+(p) + \beta_-(p)}{\alpha_m(p)\alpha_f(p)} \\
&K^{ff'}(\alpha_+^f, \alpha_-^m) = -\frac{1}{2} \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m} \frac{1}{\alpha_f(p)} + \frac{1}{2} \frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f} \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \frac{1}{\alpha_m(p)} + \\
&+\frac{1}{4} \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \frac{\beta_+(p) + \beta_-(p)}{\alpha_m(p)\alpha_f(p)}
\end{aligned}
\tag{84}
$$

$$
\begin{aligned}
&K^{ff'}(\alpha_+^f, \alpha_-^f) = \\
&= -\frac{1}{8} (C_+^f)^2 \frac{(\alpha_+^f(p) - \alpha_+^m(p))^2}{\varepsilon_+^m \alpha_+^f(p) \alpha_f^2(p)} - \frac{1}{8} (C_-^f)^2 \frac{(\alpha_-^f(p) - \alpha_-^m(p))^2}{\varepsilon_-^m \alpha_-^f(p) \alpha_f^2(p)} + \\
&+\frac{1}{8} \frac{(\alpha_+^f(p) + \alpha_-^f(p))(\alpha_+^f(p)\alpha_-^f(p) + p^2)}{\alpha_+^f(p)\alpha_-^f(p)\alpha_f^2(p)} - \frac{1}{8} \frac{(\beta_+(p) + \beta_-(p))^2}{\alpha_m(p)\alpha_f^2(p)} + \\
&\frac{1}{2} \left(\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f} \frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m} + \frac{C_-^m}{\varepsilon_+^f} \frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m} \right) \frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{1}{4} \left(\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f} + \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \right) \frac{\beta_+(p) + \beta_-(p)}{\alpha_m(p)\alpha_f(p)} \\
&-\frac{1}{2} \frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f} \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \frac{1}{\alpha_m(p)} + \\
&+\frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m}\right) \left(\frac{\kappa_+^f}{\varepsilon_+^f}\right)^2 \cdot \frac{z_1}{\alpha_+^f} - \left(1 - \frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m}\right) \left(\frac{\kappa_-^f}{\varepsilon_-^f}\right)^2 \cdot \frac{z_2}{\alpha_-^f} \right] \frac{1}{\alpha_f(p)}.
\end{aligned}
\tag{85}
$$

3. $z_1 \leq 0, \quad z_2 \geq 0$

$$
\begin{aligned}
K^{ff'}(\alpha_-^m, \alpha_+^m) &= K^{ff'}(\alpha_+^m, \alpha_-^m), \\
K^{ff'}(\alpha_-^m, \alpha_+^f) &= K^{ff'}(\alpha_+^f, \alpha_-^m), \\
K^{ff'}(\alpha_-^f, \alpha_+^m) &= K^{ff'}(\alpha_+^m, \alpha_-^f), \\
K^{ff'}(\alpha_-^f, \alpha_+^f) &= K^{ff'}(\alpha_+^f, \alpha_-^f).
\end{aligned}
\tag{86}
$$

4. $z_1 \leq 0, \quad z_2 \leq 0$

$$
\begin{aligned}
&C_-^{ff'(bulk)}(s_{12}, |z_1 - z_2|) = \\
&= \frac{1}{(\varepsilon_-^f)^2} \left(1 - \frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m}\right) \left(1 - \frac{\kappa_-^f}{\sqrt{\varepsilon_-^f}} R_{12}\right) \frac{e^{-\frac{\kappa_-^f}{\sqrt{\varepsilon_-^f}} R_{12}}}{R_{12}} + \\
&+\frac{C_-^m}{\varepsilon_-^m (\varepsilon_-^f)^2} \left[C_-^f \frac{e^{-\frac{\kappa_-^f}{\sqrt{\varepsilon_-^f}} R_{12}}}{R_{12}} - C_-^m \frac{e^{-\frac{\kappa_-^m}{\sqrt{\varepsilon_-^m}} R_{12}}}{R_{12}} \right]
\end{aligned}
\tag{87}
$$

$$
\begin{aligned}
&K^{ff'}(\alpha_-^m, \alpha_-^m) = -\frac{1}{2} \left(\frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f}\right)^2 \left(\frac{1}{\alpha_m(p)} - \frac{1}{\varepsilon_-^m \alpha_-^m(p)}\right) \\
&K^{ff'}(\alpha_-^m, \alpha_-^f) = -\frac{1}{2} \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m} \frac{1}{\alpha_f(p)} + \frac{1}{2} \left(\frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f}\right)^2 \frac{1}{\alpha_m(p)} + \\
&+\frac{1}{2} \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \frac{\beta_+(p) + \beta_-(p)}{\alpha_m(p)\alpha_f(p)} \\
&K^{ff'}(\alpha_-^f, \alpha_-^m) = K^{ff'}(\alpha_-^m, \alpha_-^f)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&K^{ff'}(\alpha_-^f, \alpha_-^f) = \\
&= -\frac{1}{8} (C_+^f)^2 \frac{\alpha_+^f(p) - \alpha_+^m(p))^2}{\varepsilon_+^m \alpha_+^f(p) \alpha_p^2(p)} - \frac{1}{8} (C_-^f)^2 \frac{(\alpha_-^f(p) - \alpha_-^m}{\varepsilon_-^m \alpha_-^f(p) \alpha_f^2(p)} + \\
&+\frac{1}{8} \frac{(\alpha_+^f(p) + \alpha_-^f(p))(\alpha_+^f(p)\alpha_-^f(p) + p^2)}{\alpha_+^f(p)\alpha_-^f(p)\alpha_p^2(p)} - \frac{1}{8} \frac{(\beta_+(p) + \beta_-(p))^2}{\alpha_m(p)\alpha_f^2(p)} + \\
&+\frac{1}{2} \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m} \left(\frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{1}{\varepsilon_-^f \alpha_-^f(p)} \right) + \\
&+\frac{1}{2} \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \left(\frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m} \frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \frac{1}{\alpha_m(p)} \right) - \frac{1}{2} \frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f} \frac{\beta_+(p) + \beta_-(p)}{\alpha_m(p)\alpha_f(p)} \\
&-\frac{1}{4} \left(1 - \frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m}\right) \frac{\alpha_-^f(p) + p^2}{(\varepsilon_-^f)^2 (\alpha_-^f(p))^3} + \\
&+\frac{1}{4} \left(1 - \frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m}\right) \left(\frac{1}{\alpha_f(p)} - \frac{1}{\varepsilon_-^f \alpha_-^f(p)} \right) \frac{(\frac{\kappa_-^f)^2}{\varepsilon_-^f}(z_1 + z_2)}{\alpha_+^f(p)}
\end{aligned}
\tag{88}
$$

Об'ємні частини екранованого потенціалу$G_\pm^{mf(bulk)}$ подібно, як просторовонеоднорідну можна представити у вигляді

$$
G_\pm^{mf(bulk)}(s_{12}, |z_1 - z_2|) =
$$

$$\frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})\left\{K^{mf(bulk)}(\alpha_\pm^m,\alpha_\pm^m)e^{-\alpha_\pm^m(p)|z_1-z_2|}+\right.$$
$$\left.K^{mf(bulk)}(\alpha_\pm^f,\alpha_\pm^f)e^{-\alpha_\pm^f(p)|z_1-z_2|}\right\} \qquad (89)$$

Коефіцієнти при експонентах в (89) мають вигляд

$$\begin{aligned} K^{mf(bulk)}(\alpha_+^m,\alpha_+^m) &= \frac{1}{2}\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\frac{1}{\varepsilon_+^m\alpha_+^m(p)}, \\ K^{mf(bulk)}(\alpha_+^f,\alpha_+^f) &= -\frac{1}{2}\frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m}\frac{1}{\varepsilon_+^f\alpha_+^f(p)}, \\ K^{mf(bulk)}(\alpha_-^m,\alpha_-^m) &= \frac{1}{2}\frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f}\frac{1}{\varepsilon_-^m\alpha_-^m(p)}, \\ K^{mf(bulk)}(\alpha_-^f,\alpha_-^f) &= -\frac{1}{2}\frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m}\frac{1}{\varepsilon_-^f\alpha_-^f(p)}. \end{aligned} \qquad (90)$$

Аналогічно (89) для об'ємних екранованих потенціалів $G_\pm^{ff'(bulk)}$ маємо

$$G_\pm^{ff'(bulk)}(s_{12},|z_1-z_2|)=$$
$$\frac{1}{T}\int_0^\infty pdpJ_0(ps_{12})\left\{K^{ff'(bulk)}(\alpha_\pm^m,\alpha_\pm^m)e^{-\alpha_\pm^m(p)|z_1-z_2|}+\right.$$
$$\left.K^{ff'(bulk)}(\alpha_\pm^f,\alpha_\pm^f)e^{-\alpha_\pm^f(p)|z_1-z_2|}\right\}, \qquad (91)$$

де:

$$K^{ff'(bulk)}(\alpha_+^m,\alpha_+^m)=-\frac{1}{2}\left(\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\right)^2\frac{1}{\varepsilon_+^m\alpha_+^m(p)},$$

$$K^{ff'(bulk)}(\alpha_+^f,\alpha_+^f)=$$
$$=\frac{1}{4}\left(1-\frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m}\right)\frac{1}{(\varepsilon_+^f\alpha_+^f(p))^2}\left[\frac{(\alpha_+^f(p))^2+p^2}{\alpha_+^f(p)}-\frac{(\kappa_+^f)^2}{\varepsilon_+^f}|z_1-z_2|\right] \qquad (92)$$
$$+\frac{1}{2}\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\frac{C_+^f}{\varepsilon_+^m}\frac{1}{\varepsilon_+^f\alpha_+^f(p)},$$

$$K^{ff'(bulk)}(\alpha_+^m,\alpha_+^m)=-\frac{1}{2}\left(\frac{C_+^m}{\varepsilon_+^f}\right)^2\frac{1}{\varepsilon_+^m\alpha_+^m(p)},$$
$$K^{ff'(bulk)}(\alpha_-^m,\alpha_-^m)=-\frac{1}{2}\left(\frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f}\right)^2\frac{1}{\varepsilon_-^m\alpha_-^m(p)},$$
$$K^{ff'(bulk)}(\alpha_-^f,\alpha_-^f)= \qquad (93)$$
$$=\frac{1}{4}\left(1-\frac{C_-^f}{\varepsilon_-^f}\right)\frac{1}{\varepsilon_-^f\alpha_-^f(p))^2}\left[\frac{(\alpha_-^f(p))^2+p^2}{\alpha_-^f(p)}-\frac{(\kappa_-^f)^2}{\varepsilon_-^f}|z_1-z_2|\right]$$
$$+\frac{1}{2}\frac{C_-^m}{\varepsilon_-^f}\frac{C_-^f}{\varepsilon_-^m}\frac{1}{\varepsilon_-^f\alpha_-^f(p)}.$$

Асимптотична поведінка міжчастинкових кореляцій приведена для системи, в якій концентрація іонів у пористій підсистемі та нижній частині рідинної підсистеми рівна нулеві.

Коефіцієнти поздовжніх асимптотик парних кореляцій між іонами пористого та рідинного середовищ рівні:

$$\begin{aligned} A_{++}^{mf} &= \frac{2}{\varepsilon_+^m(\kappa_+^f)^2}e^{-\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}z_2}\times \\ &\times\left[\frac{\varepsilon_-^f}{\varepsilon_+^f}e^{-\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}z_1}+\frac{\varepsilon_+^m-\varepsilon_-^m}{\varepsilon_+^m+\varepsilon_-^m}\left(\frac{\varepsilon_-^f}{\varepsilon_+^f}+\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}z_1\right)\right], \\ &\qquad (z_1\ge 0,\quad z_2\ge 0), \\ A_{+-}^{mf} &= \frac{2}{\varepsilon_+^m(\kappa_+^f)^2}\left\{\left(\frac{\varepsilon_-^f}{\varepsilon_+^f}+\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}|z_2|\right)e^{-\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}z_1}+\right. \\ &\qquad (z_1\ge 0,\quad z_2\le 0), \\ &+\left.\frac{\varepsilon_+^m-\varepsilon_-^m}{\varepsilon_+^m+\varepsilon_-^m}\left[\frac{\varepsilon_-^f}{\varepsilon_+^f}+\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}(z_1+|z_2|)\right]\right\}, \\ &\qquad (z_1\ge 0,\quad z_2\le 0), \\ A_{-+}^{mf} &= \frac{4}{(\varepsilon_+^m+\varepsilon_-^m)(\kappa_+^f)^2}\left(\frac{\varepsilon_-^f}{\varepsilon_+^f}+\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}|z_1|\right)e^{-\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}z_2}, \\ &\qquad (z_1\le 0,\quad z_2\ge 0), \end{aligned}$$

$$A_{--}^{mf} = \frac{4}{(\varepsilon_+^m + \varepsilon_-^m)(\kappa_+^f)^2} \times$$
$$\times \left(\frac{\varepsilon_-^f}{\varepsilon_+^f} + \frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}} |z_1 + z_2| + (\kappa_+^f)^2 \cdot \frac{(z_1+z_2)^2}{\varepsilon_-^m \varepsilon_-^f} \right),$$
$$(z_1, \quad z_2 \le 0). \tag{94}$$

У випадку взаємодії двох іонів рідинних середовищ коефіцієнти асимптотик мають вигляд

$$A_{++}^{ff} = \left[A_{ff} + \frac{1}{(\varepsilon_+^f \kappa_+^f)^2} \frac{\varepsilon_+^m - 1}{\varepsilon_+^m} \frac{\kappa_+^f}{\varepsilon_+^m} \frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}} (z_1 + z_2) \right] e^{-\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}}(z_1+z_2)},$$
$$(z_1, \quad z_2 \ge 0),$$
$$A_{+-}^{ff} = \left\{ A_{ff} + \frac{1}{(\varepsilon_+^f \kappa_+^f)^2} \left[(\kappa_+^f)^2 \frac{\varepsilon_+^m - 1}{\varepsilon_+^m} z_1 \cdot |z_2| - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}} \frac{\varepsilon_+^m - 1}{\varepsilon_+^m} (\varepsilon_+^f |z_2| - \varepsilon_-^f \cdot z_1) + 2(\varepsilon_+^f)^2 \frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}} |z_2| \right] \right\} \times$$
$$\times \; e^{-\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}} z_1},$$
$$(z_1 \ge 0, \quad z_2 \le 0),$$
$$A_{-+}^{ff} = \left\{ A_{ff} + \frac{1}{(\varepsilon_+^f \kappa_+^f)^2} \left[(\kappa_+^f)^2 \frac{\varepsilon_+^m - 1}{\varepsilon_+^m} |z_1| \cdot z_2 - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}} \frac{\varepsilon_+^m - 1}{\varepsilon_{-m}} (\varepsilon_+^f |z_1| - \varepsilon_-^f z_2) + 2(\varepsilon_+^f)^2 |z_1| \right] \right\} e^{-\frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}} z_2},$$
$$(z_1 \le 0, \quad z_2 \ge 0),$$
$$A_{--}^{ff} = A_{ff} + \frac{1}{\varepsilon_+^f (\kappa_+^f)^2} \left(2\varepsilon_+^f - \frac{\varepsilon_+^m - 1}{\varepsilon_+^m} \right) \frac{\kappa_+^f}{\sqrt{\varepsilon_+^f}} |z_1 + z_2|,$$
$$(z_1, \quad z_2 \le 0), \tag{95}$$

де

$$A_{ff} = \frac{2}{\varepsilon_+^f (\kappa_+^f)^2} \left(\frac{\varepsilon_+^f + \varepsilon_-^f}{\varepsilon_+^m \varepsilon_+^f} + \frac{\varepsilon_+^f \varepsilon_-^f + \varepsilon_+^f - \varepsilon_-^f}{\varepsilon_+^f} - \frac{4}{\varepsilon_+^m + \varepsilon_-^m} \right).$$

Література

1. M. Mezard, G. Parisi, M.A. Virasoro. Spin Class Theory and Beyond. // World Scientific, Singapore, 1987.
2. I.A. Given, G. Stell. Physica A 209, p. 495, 1994.
3. B. Hribar, O. Pizio, A. Trokhymchuk, V. Vlachy. J. Chem. Phys., 1998, vol. 109, p. 2480.
4. M.F. Holovko, Z.V. Polishchuk. Cond. Matt. Phys., 1999, vol. 2, No 2, p. 1-6.
5. O. Pizio, S.Sokolowski. J. Phys. Studies, 1998, vol. 2, No 3, p. 283.
6. Юхновський И.Р., Головко М.Ф., Совьяк Е.Н. Препринт ИТФ-82-159Р, 18 с., 1982.
7. Є.М. Сов'як. Cond. Matt. Phys., 1993, vol. 2, p. 84.
8. Гахов Ф.Д., Черский Ю.И. Уравнения типа свертки. М. Наука, 295 с., 1978.
9. А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. Интегралы и ряды. М. Наука, 797 с., 1981.
10. Nichols A.L., Pratt L.R. J. Chem. Phys., 1982, vol. 76, p. 3782.
11. Загородний А.Г., Усенко А.С., Якименко И.П. Препринт ИТФ-82-75Р, 40 с., 1982.
12. Є.М. Сов'як. Укр. фіз. журн., 1990, т. 35, N 2, с. 300.
13. Jancovici B. J. Stat. Phys., 1982, vol. 28, p. 43.
14. Nicholls A.L., Pratt L.P. J. Chem. Phys., 1982, vol. 77, p. 1070.

Мирослав Федорович Головко
Євген Миколайович Сов'як

Екрановані потенціали просторово неоднорідної системи: іон-дипольна суміш - пористе середовище

Роботу отримано 28 липня 1999 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії розчинів

Виготовлено при ІФКС НАН України