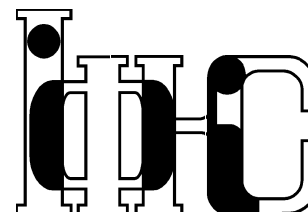


Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

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/>)

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

Йосип Андрійович Гуменюк
Михайло Васильович Токарчук

ІНТЕГРАЛЬНІ ДУЖКИ ТА ФУНКЦІЇ РОЗСІЯННЯ КІНЕТИЧНОЇ ТЕОРІЇ
ГУСТИХ ГАЗОВИХ СУМІШЕЙ З БАГАТОСХОДИНКОВОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

Роботу отримано 11 грудня 2013 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантово-статистичної
теорії процесів каталізу

Виготовлено при ІФКС НАН України
© Усі права застережені

ICMP-13-07U

Й.А. Гуменюк, М.В. Токарчук

ІНТЕГРАЛЬНІ ДУЖКИ ТА ФУНКЦІЇ РОЗСІЯННЯ
КІНЕТИЧНОЇ ТЕОРІЇ ГУСТИХ ГАЗОВИХ СУМІШЕЙ
З БАГАТОСХОДИНКОВОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

ЛЬВІВ

УДК: 533.7; 532.7; 533.1

PACS: 05.20.Dd, 51.10.+y, 05.60.Cd, 05.60.-k

Інтегральні дужки та функції розсіяння кінетичної теорії густих газових сумішей з багатосходинковою взаємодією

Й.А. Гуменюк, М.В. Токарчук

Анотація. Для лінеаризованої кінетичної теорії густих газових сумішей з багатосходинковою взаємодією у наближенні кількох перших многочленів Соніна-Ляґера знайдено матричні елементи лінеаризованого оператора зіткнень. Їх виражено через омега-інтеграли, що стосуються всього багатосходинкового потенціала. Одержано транспортні перерізи розсіяння від процесів опускання, підйому та відбиття на сходинок як явні функції відносної швидкості. Для процесів опускання і підйому виявлено нові типи транспортних перерізів, пов'язані зі зміною лише модуля відносної швидкості. Знайдено відповідні парціальні омега-інтеграли у залежності від висоти сходинок і температури.

Integral brackets and pair-scattering functions of the kinetic theory for dense gaseous mixtures with multistep interaction

Y.A. Humenyuk, M.V. Tokarchuk

Abstract. Matrix elements of the linearized collision operator of linearized kinetic theory for dense gaseous mixtures with multistep interaction are found in the approximation of several first Sonine-Laguerre polynomials. They are expressed in terms of omega-integrals referred to the whole multistep potential. Pair-collision cross-sections for descending, ascending, and reflection processes on a step are obtained as functions of the relative velocity of particles. New types of cross-sections for the descending and ascending processes are revealed which concern with change of absolute value of the relative velocity only. Corresponding partial omega-integrals are found as dependences on a step height and temperature.

1. Вступ

Важлива проблема у теорії коефіцієнтів переносу густих газових сумішей — це відтворення їхніх залежностей від температури. У кінетичній теорії Енскоґа [1, 2], побудованій для моделі твердих кульок, ці температурні залежності зумовлені опосередковано. А саме — через термодинамічні характеристики та температурну залежність діаметра твердої кульки, яка отримується з використанням експериментальних даних.

На противагу цьому, кінетичні теорії для систем з *розривними* модельними міжчастинковими потенціалами у формі прямокутної ями [3–5] чи багатосходинкової (БС) функції [6–8] призводять до *явної* залежності коефіцієнтів переносу від температури. Тут вона зумовлена врахуванням миттєвих парних взаємодій на розривах потенціалів, які моделюють незавершені процеси парного розсіяння частинок з реалістичною взаємодією. Це особливо важливо для відстаней, характерних для молекулярного притягання. Хід реального потенціала взаємодії тут пологіший, а незавершеність парних зіткнень при високих густинах для такої його поведінки більш характерна.

Таким чином, розривні модельні потенціали дають змогу, принаймні якісно, відслідкувати прояви далекосяжної частини взаємодії у коефіцієнтах переносу і з'ясувати її роль у формуванні їх температурних залежностей.

Щодо використання формул для коефіцієнтів переносу, то в літературі наведено лише остаточні вирази: як для прямокутної ями в односортному [3–5] і двосортному [9, 10] випадках та для її модифікацій [11], так і для односортних систем із БС потенціалом [6, 8, 12]. Результати для двосортних сумішей частинок з потенціалом прямокутної ями [9, 10], отримані в 60-х роках ХХ століття, представлено у доволі громіздкому вигляді. Їх одержано без дотримання закону збереження енергії на гідродинамічному рівні опису, а для парної функції розподілу використано наближення локальної рівноваги, яке можна суттєво покращити [4, 5].

У праці [13] виведено аналітичні вирази для коефіцієнтів переносу густої газової суміші з БС потенціалом у найнижчих наближеннях Чепмена-Енскоґа. Однак, їх потрібно доповнити формулами для відповідних функцій розсіяння (омега-інтегралів). Зважаючи на це, ми тут наводимо детальніші результати, зокрема для матричних елементів лінеаризованого оператора зіткнень. Основну увагу звернуто на розрахунок транспортних перерізів розсіяння і омега-інтегралів

від процесів різного типу на притягальних і відштовхувальних сходинках БС потенціала та їх класифікації. Тому цей препринт — це, фактично, доповнення роботи [13].

Матеріал викладено так. У §2 після введення лінеаризованого оператора зіткнень отримано системи лінійних алгебричних рівнянь для поправок, означено інтегральні дужки і згадано їхні властивості симетрії. У §3 означено транспортні перерізи розсіяння, парціальні омега-інтеграли та їхні комбінації і наведено основні результати — вираження інтегральних дужок через омега-інтеграли, що стосуються всього БС потенціала. Для комбінацій омега-інтегралів наведено аналітичні вирази у залежності від параметрів БС потенціала (і температури). Отримані результати підсумовано у §4, зазначено їхній зв'язок із роботами інших авторів та можливі перспективи застосування.

У додатках наведено детальніші розрахунки і результати для парціальних інтегральних дужок (дод. А), транспортних перерізів розсіяння (дод. В) та омега-інтегралів для різних типів процесів на сходинках БС потенціала (дод. С). Як довідку, наведено відомості про необхідні спеціальні функції та деталі проведення характерних інтегрувань за відносною швидкістю (дод. D).

2. Інтегральні рівняння лінеаризованої кінетичної теорії

Нехай M -сортна густа газова суміш з багатосходиновою міжчастинковою взаємодією перебуває у нерівноважному стані, що слабко відрізняється від стану локальної рівноваги. Градієнти температури, гідродинамічної швидкості і хімічних потенціалів сортових складників суміші *мали*, тому густини внутрішньої енергії, імпульсу та сортові густини числа частинок *повільно* змінюються у просторі й часі.

Функції розподілу. Розгляньмо більш детально пошук сортових одночастинкових функцій розподілу $\{f\} \equiv \{f_1, \dots, f_M\}$ при зазначених умовах. У першому порядку методу Чепмена-Енскога кожен з них шукають [1, 2, 14] у вигляді суми локально-рівноважної функції розподілу f_i^0 і малого відхилення ϕ_i :

$$f_i(\mathbf{c}_i) = f_i^0(\mathbf{c}_i)[1 + \phi_i(\mathbf{c}_i)],$$

де f_i^0 має локально-максвелівську форму [13],

$$f_i^0(\mathbf{r}, \mathbf{c}_i, t) = n_i(\mathbf{r}, t) \left(\frac{m_i}{2\pi k_B T^{k0}(\mathbf{r}, t)} \right)^{3/2} e^{-\frac{m_i \mathbf{c}_i^2}{2k_B T^{k0}(\mathbf{r}, t)}},$$

а m_i та n_i — маса частинки сорту i та густина числа цих частинок, $\mathbf{c}_i \equiv \mathbf{v}_i - \mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$ — теплова швидкість. Функції f_i^0 та ϕ_i залежать від просторових координат \mathbf{r} і часу t через гідродинамічні змінні, але ми не будемо вказувати цих залежностей.

Мультиплікативна поправка ϕ_i лінійна за градієнтами гідродинамічних змінних — кінетичної температури в нульовому порядку $T^{k0}(\mathbf{r}, t)$, гідродинамічної швидкості $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$ та хімічних потенціалів кожного сорту $\mu_1(\mathbf{r}, t), \dots, \mu_M(\mathbf{r}, t)$, див. [13]. У залежності від безрозмірної швидкості $\mathbf{C}_i \equiv \sqrt{\tilde{m}_i} \mathbf{c}_i$, де позначено $\tilde{m}_i \equiv m_i / (2k_B T^{k0})$, поправка ϕ_i має вигляд:

$$\phi_i(\mathbf{C}_i) = -A_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{X}_T - B_i \mathbf{C}_i^c \mathbf{C}_i : \nabla \mathbf{V} - H_i \nabla \cdot \mathbf{V} - \sum_k E_{ik} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{X}_k. \quad (1)$$

Невідомі функції A_i , B_i , H_i та E_{ik} , що залежать від C_i^2 , визначають ступінь відхилення розподілу від локально-максвелівського. Тут $\mathbf{C}_i^c \mathbf{C}_i \equiv \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} C_i^2 \mathbf{1}$ — тензор другого рангу з нульовим слідом, $\mathbf{X}_T \equiv \nabla \ln T^{k0}$, а $\mathbf{X}_k \equiv -(1/m_k)(\nabla \mu_k)_{T^{k0}}$ — градієнт хімічного потенціала при сталій температурі.

Лінеаризований оператор зіткнень. Набір поправок $\{\phi\} \equiv \{\phi_1, \dots, \phi_M\}$ задовольняє систему M неоднорідних інтегральних рівнянь такого загального вигляду:

$$J_i[\phi] = L_i, \quad (2)$$

де $J_i[\cdot]$ — лінеаризований оператор зіткнень, а L_i позначає неоднорідну частину, наведену явно у препринті [13].

Відповідно до структури БС потенціала, оператор J_i має внески від усеможливих процесів p на його сходинках різних типів q . А саме — від процесу відштовхування $p = \odot$ на твердій серцевині ($q = c$) та трьох процесів опускання \oplus , підйому \ominus і відбиття \otimes на відштовхувальних ($q = r$) і притягальних ($q = a$) сходинках:

$$J_i[\phi] = \sum_{j=1}^M J_{ij}[\phi], \quad J_{ij}[\phi] \equiv \sum_q \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} \sum_p \overset{c|r,a}{\ominus|\oplus,\ominus,\otimes} J_{ij}^{qlp}[\phi], \quad (3)$$

де l нумерує сходинки типу q . Є одна тверда серцевина ($K_{ij}^c = 1$) та K_{ij}^r відштовхувальних і K_{ij}^a притягальних сходинок. Інтеграл зіткнень від окремого процесу p на сходинці $\{q, l\}$ має вигляд:

$$J_{ij}^{qlp}[\phi] \equiv (\sigma_{ij}^{ql})^2 g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p} \int d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{ji\sigma} \theta^p(c_{ji\sigma}) f_i^0 f_j^0 [\phi_i^{qlp} + \phi_j^{qlp} - \phi_i - \phi_j], \quad (4)$$

де σ_{ij}^{ql} — позиція сходинки $\{q, l\}$. Параметр γ_p визначає для процесу p , яке граничне значення — праве чи ліве — парної функції розподілу $g_2^{ij}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}$ на сходинці типу q потрібно взяти. Він набуває таких значень:

$$\gamma_{\{\odot, \otimes, \oplus, \ominus\}} = \{+1, -q, q, -q\},$$

де прийнято числову параметризацію: $q = r = -1$, $q = a = +1$, а також $p = \oplus = +1$, $p = \ominus = -1$. Крім того, у ф. (4) використано позначення: $\mathbf{c}_{ji} \equiv \mathbf{c}_j - \mathbf{c}_i$ — відносна швидкість частинок, $c_{ji\sigma} \equiv \mathbf{c}_{ji} \cdot \hat{\sigma}$ — її проекція на одиничний вектор $\hat{\sigma}$ взаємного розташування центрів частинок на відстані σ_{ij}^{ql} у процесі p ; $\phi_i \equiv \phi_i(\mathbf{c}_i)$, $\phi_j \equiv \phi_j(\mathbf{c}_j)$, $\phi_i^{qlp} \equiv \phi_i(\mathbf{c}_i^{qlp})$ та $\phi_j^{qlp} \equiv \phi_j(\mathbf{c}_j^{qlp})$ — значення функцій до і після парного процесу p на сходинці $\{q, l\}$.

Швидкості частинок після процесів \odot та \otimes дорівнюють [1, 2]:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_i^{qlp} \Big|_{p=\{\odot, \otimes\}} &= \mathbf{c}_i + 2M_j \mathbf{c}_{ji} \cdot \hat{\sigma} \hat{\sigma}, \\ \mathbf{c}_j^{qlp} \Big|_{p=\{\odot, \otimes\}} &= \mathbf{c}_j - 2M_i \mathbf{c}_{ji} \cdot \hat{\sigma} \hat{\sigma}; \end{aligned} \quad (5)$$

тут $M_k = m_k / (m_i + m_j) \Big|_{k=\{i,j\}}$ — відносна маса. Після процесів \oplus і \ominus швидкості визначаються так [13, 15, 16]:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_i^{qlp} \Big|_{p=\{\oplus, \ominus\}} &= \mathbf{c}_i + M_j [c_{ji\sigma} - \sqrt{c_{ji\sigma}^2 + p(v_{ij}^{ql})^2}] \hat{\sigma}, \\ \mathbf{c}_j^{qlp} \Big|_{p=\{\oplus, \ominus\}} &= \mathbf{c}_j - M_i [c_{ji\sigma} - \sqrt{c_{ji\sigma}^2 + p(v_{ij}^{ql})^2}] \hat{\sigma}, \end{aligned} \quad (6)$$

де $v_{ij}^{ql} = (2\epsilon_{ij}^{ql} / \mu_{ij})^{1/2}$ — висота сходинки в одиницях швидкості, $\mu_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$ — зведена маса.

Зауважмо, що сорт i та решта сортів j ($j \neq i$) по-різному проявляються у формуванні оператора J_i , ф. (3). Тому, що J_{ij}^{qlp} , ф. (4), завдяки своїй лінійності адитивно враховує зміну розподілів ϕ_i та ϕ_j , його зручно подати як суму окремих дій “вкороченого” оператора \tilde{J}_{ij}^{qlp} на кожен із цих розподілів:

$$J_{ij}^{qlp}[\phi] = \tilde{J}_{ij}^{qlp}[\phi_i] + \tilde{J}_{ij}^{qlp}[\phi_j]. \quad (7)$$

Дія нового оператора на ϕ_k , де $k = \{i, j\}$, визначається так:

$$\tilde{J}_{ij}^{qlp}[\phi_k] \equiv (\sigma_{ij}^{ql})^2 g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p} \int d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{ji\sigma} \theta^p(c_{ji\sigma}) f_i^0 f_j^0 [\phi_k^{qlp} - \phi_k]. \quad (8)$$

Тоді повний оператор набуває вигляду:

$$J_i[\phi] = \sum_{j=1}^M \tilde{J}_{ij}[\phi_i] + \tilde{J}_{ij}[\phi_j] \Big|_{j=i} + \sum_{j=1(\neq i)}^M \tilde{J}_{ij}[\phi_j], \quad (9)$$

де \tilde{J}_{ij} пов'язаний із \tilde{J}_{ij}^{qlp} таким же співвідношенням, як у ф. (3). Звідси видно структуру J_i : внески сорту i формують діагональну його частину, а всі решта сорти j ($j \neq i$) — недіагональну. Це представлення буде використано нижче при переході від систем інтегральних рівнянь до їхніх проєкцій — систем алгебричних рівнянь.

Рівняння для функцій-компонент та інтегральні дужки. Кожна з функцій $\{A, B, H, E\}$ задовольняє своє лінійне інтегральне рівняння. Його отримуємо, підставивши у рівняння (2) вираз (1) для $\{\phi\}$, див. [13]. Однак, для функцій $\{H\}$ як операторна, так і неоднорідна частини містять додаткові внески, зумовлені врахуванням обміну між кінетичною і потенціальною складовими густини внутрішньої енергії і залученням [4, 5] у метод Чепмена-Енскога оберненої потенціальної квазітемператури β^p , див. [13].

Функції $\{A, B, H, E\}$ шукають [1, 2] у вигляді розкладів за повним набором многочленів Соніна-Лягера показника ν зі значенням $\{3/2, 5/2, 1/2, 3/2\}$, відповідно:

$$F_i(C_i^2) = \sum_{m=0}^{\infty} f_i^m S_\nu^m(C_i^2), \quad (10)$$

де F позначає одну з чотирьох функцій. Тому, що інтегральні рівняння для них (в тому числі й для $\{H\}$) подібні між собою, ми далі розглядаємо їх у спільних позначеннях:

$$-J_i[F(C^2)\mathbf{C}^{[\nu]}] = f_i^0 \mathcal{L}_i^F \mathbf{c}_i^{[\nu]}, \quad (11)$$

де \mathcal{L}_i^F — відповідна функція неоднорідної частини L_i . Позначення $\mathbf{C}_i^{[\nu]}$ для конструкцій вектора \mathbf{C}_i (та \mathbf{c}_i) означає: $\mathbf{C}_i^{[1/2]} \equiv 1$, $\mathbf{C}_i^{[3/2]} \equiv \mathbf{C}_i$ та $\mathbf{C}_i^{[5/2]} \equiv \mathbf{C}_i^2 \mathbf{C}_i$. Позначмо ще $\tilde{m}_i^{[1/2; 3/2; 5/2]} \equiv \{1; \tilde{m}_i^{1/2}; \tilde{m}_i\}$; це позначення введено так, щоб мало місце $\tilde{m}_i^{[\nu]} \mathbf{c}_i^{[\nu]} = \mathbf{C}_i^{[\nu]}$.

Операторну частину ф. (11) виразім через \tilde{J}_{ij}^{qlp} згідно ф. (7):

$$J_i[F(C^2)\mathbf{C}^{[\nu]}] = \sum_j \left\{ \tilde{J}_{ij}[F_i(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}] + \tilde{J}_{ij}[F_j(C_j^2)\mathbf{C}_j^{[\nu]}] \right\}. \quad (12)$$

Рівняння (11) стосується якогось вибраного сорту i , але J_i діє на функції всіх сортів. Тому запис у вигляді (12) означає *виділення* діагональної (з F_i) та недіагональної (з F_j) частин. Остання, щоправда, містить ще один діагональний внесок, коли $j = i$, див. ф. (9). Підставивши розклад (10), отримуємо операторну частину у вигляді, де вже фігурують невідомі коефіцієнти розкладу $\{f^m\}$:

$$J_i[F(C^2)\mathbf{C}^{[\nu]}] = \sum_j \sum_{m=0}^{\infty} \left\{ f_i^m \tilde{J}_{ij}[S_\nu^m(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}] + f_j^m \tilde{J}_{ij}[S_\nu^m(C_j^2)\mathbf{C}_j^{[\nu]}] \right\},$$

а лінійні оператори \tilde{J}_{ij} діють на вже *відомі* функції — многочлени Соніна-Лягера.

Спроекуймо результат дії цих операторів на відповідні набори многочленів $\{S_\nu\}$. Для цього праву частину останнього виразу треба домножити скалярно на $\tilde{m}_i^{[\nu]} S_\nu^n(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}$ й проінтегрувати за \mathbf{c}_i . Одержимо системи *алгебричних* рівнянь для невідомих коефіцієнтів $\{f^m\}$:

$$\tilde{m}_i^{[\nu]} \sum_{m=0}^{\infty} \left\{ f_i^m \left[\sum_{j=1}^M \mathcal{B}_{ij;\nu}^{\prime;mn} + \mathcal{B}_{ii;\nu}^{\prime;mn} \right] + \sum_{j \neq i}^M f_j^m \mathcal{B}_{ij;\nu}^{\prime;mn} \right\} = K_i^{F,n}. \quad (13)$$

Коефіцієнти $K_i^{F,n}$ — це проекції правої частини рівняння (11) на $\tilde{m}_i^{[\nu]} S_\nu^n(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}$. Їхній явний вигляд подано в праці [13] і тут не використовується.

У цій роботі ми цікавимося лише лівою (операторною) частиною, а саме, величинами \mathcal{B} біля невідомих коефіцієнтів $\{f^m\}$, які називають *інтегральними дужками*. Вони мають сенс коефіцієнтів розкладу за повним набором многочленів Соніна-Лягера дії операторів \tilde{J}_{ij} на функції $S_\nu^m(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}$ та $S_\nu^m(C_j^2)\mathbf{C}_j^{[\nu]}$:

$$\mathcal{B}_{ij;\nu}^{\prime;mn} \equiv - \int d\mathbf{c}_i \tilde{J}_{ij}[S_\nu^m(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}] \odot S_\nu^n(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}, \quad (14)$$

$$\mathcal{B}_{ij;\nu}^{\prime;mn} \equiv - \int d\mathbf{c}_i \tilde{J}_{ij}[S_\nu^m(C_j^2)\mathbf{C}_j^{[\nu]}] \odot S_\nu^n(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}. \quad (15)$$

Тут \odot означає звичайне перемноження (для $\nu = 1/2$), скалярне перемноження двох векторів (для $\nu = 3/2$) і повну згортку двох тензорів

(для $\nu = 5/2$). Легко бачити, що інтеграли у ф. (14) і (15) відрізняються між собою лише індексом сорту в аргументі оператора \tilde{J}_{ij} . Тому для них можна ввести *спільний* вираз:

$$\mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn} \equiv - \int d\mathbf{c}_i \tilde{J}_{ij}[S_\nu^m(C_k^2)\mathbf{C}_k^{[\nu]}] \odot S_\nu^n(C_i^2)\mathbf{C}_i^{[\nu]}, \quad (16)$$

у якому треба замість \mathbf{C}_k підставити \mathbf{C}_i для $k = i$ і \mathbf{C}_j для $k = j$. Цю відповідність ми використовуємо у розрахунку інтегральних дужок (дод. А).

Зауважмо, що матричні коефіцієнти у правій частині рівняння типу (13) для функцій $\{H\}$ містять додаткові внески [13]:

$$\sum_{m=0}^{\infty} \left\{ h_i^m \left[\sum_{j=1}^M \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;mn} + \mathcal{B}_{ii;1/2}^{\prime;mn} - \mathcal{B}_{ii;1/2}^{\beta;mn} \right] + \sum_{j \neq i}^M h_j^m \left[\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;mn} - \mathcal{B}_{ij;1/2}^{\beta;mn} \right] \right\}. \quad (17)$$

Зміщення коефіцієнтів матриці \mathcal{B} на величини $\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\beta;mn}$ зумовлене врахуванням енергетичного обміну, як додаткового ступеня вільності системи на кінетичному рівні. Воно походить від рівняння балансу потенціальної енергії в першому порядку за градієнтами і використання відповідного спряженого параметра — оберненої потенціальної кватемператури, про що вже йшла мова.

Ще варто зробити таке зауваження. Як видно з ф. (13), біля коефіцієнта f_i^m стоїть сума із $M+1$ доданків типу $\mathcal{B}_{ij;\nu}^{\prime;mn}$, тоді як біля $f_j^m|_{j \neq i}$ — лише *один* такий доданок. Коли сортів багато (напр., $M = 9$), діагональні елементи матриці \mathcal{B} формально *на порядок більші* за недіагональні. У цьому разі можна використати теорію збурень при розв'язуванні системи рівнянь (13) чи (17).

3. Результати для інтегральних дужок та омега-інтегралів

Інтегральні дужки \mathcal{B} можна розраховувати двома способами. Перший — це звичайний розрахунок для кожного показника ν і потрібних пар значень m та n . Як правило, він використовується тоді, коли компоненти $\{A, B, H, E\}$ у поправках $\{\phi\}$ наближують одним чи двома многочленами Соніна-Лягера. Коли ж у наближеннях беруть більшу їх кількість, розрахунки стають доволі трудомісткі (тим трудомісткіші, чим вищі значення m та n).

Інший спосіб засновано на тому, що самі ці многочлени можна отримати [2, 17] за допомогою *твірної функції* шляхом кратного ди-

ференціювання за двома параметрами, один з яких відповідає індексу m , а другий — індексу n . У цьому разі для кожного ν досить розрахувати одну (узгальнену) інтегральну дужку, у якій замість S_ν^m та S_ν^n [див. фф. (14), (15)] стоять твірні функції. Результати для інтегральних дужок з потрібними значеннями m та n отримуються за допомогою відшукання відповідних похідних. Цей спосіб детально описано у Ферцигера і Капера [2] для лінеаризованого оператора Больцмана.

Згідно будови оператора \tilde{J}_{ij} , як у ф. (3), інтегральні дужки (16) мають внески від процесів на твердій серцевині та сходинках:

$$\mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn} = \sum_q \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} \sum_p \mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn;qlp}. \quad (18)$$

Запишімо парціальний внесок у розгорнутому вигляді:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn;qlp} &\equiv (\sigma_{ij}^{ql})^2 g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p} \int d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\hat{\sigma} c_{ji\sigma} \theta^p(c_{ji\sigma}) f_i^0 f_j^0 \times \\ &\times [S_\nu^m (C_k^2) \mathbf{C}_k^{[\nu]} - S_\nu^m ((C_k^{qlp})^2) \mathbf{C}_k^{qlp[\nu]}] \odot S_\nu^n (C_i^2) \mathbf{C}_i^{[\nu]}. \end{aligned} \quad (19)$$

Його найзручніше розраховувати у системі центра мас. Тоді у виразі (19) будуть інтегрування за безрозмірними швидкістю центра мас \mathcal{G} та безрозмірною відносною швидкістю $\mathbf{g} \equiv \sqrt{\mu_{ij}} \mathbf{c}_{ji}$ і вектором взаємної орієнтації $\hat{\sigma}$ (дод. А). Проінтегрувати за \mathcal{G} та орієнтацією одиничного вектора $\hat{g} \equiv \mathbf{g}/g$ досить просто, а кінцеві вирази для інтегральних дужок являють собою лінійні комбінації *характерних інтегралів* за модулем g та взаємною просторовою орієнтацією $\hat{\sigma}$ частинок. Деталі розрахунку величин (19) наведено у додатку А.

Означення функцій розсіяння. Процес розсіяння двох частинок з плавним потенціалом взаємодії, який є основною міжмолекулярною подією в кінетичній теорії Больцмана, не може бути розбитий на окремі складові. Можна лише говорити про *окремі фази* цього єдиного процесу. Ще в більшій мірі так можна сказати про зіткнення двох твердих кульок — основну молекулярну подію в кінетичній теорії Енскога. Тут навіть окремих фаз процесу не можна виділити через його миттєвість.

Однак, інтеграл зіткнень кінетичної теорії систем з БС потенціалом — це *просто сума* внесків від процесів на твердій серцевині та окремо взятих сходинках.¹ Тому й функції розсіяння, через які ниж-

¹Послідовні процеси на двох і більше сусідніх сходинках теорія не враховує [6–8, 12, 13, 16].

че виражено інтегральні дужки, є сумами (об'єднаннями) внесків від окремих процесів.

Спочатку ми наведемо означення *парціальних* функцій розсіяння, тобто, внесків від окремого процесу на одній сходинці. Потім — явні вирази для інтегральних дужок в термінах об'єднань омега-інтегралів, котрі стосуються *всього* БС потенціала. І наостанок — явні вирази для характерних об'єднань парціальних омега-інтегралів.

Інтеграл за $\hat{\sigma}$ називають *транспортним перерізом розсіяння*:

$$Q_{ij}^{(s)qlp}(g) \equiv (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\hat{\sigma} \theta^p(\hat{g} \cdot \hat{\sigma}) (\hat{g} \cdot \hat{\sigma}) \left[1 - \left(\frac{g^{qlp}}{g} \cos[\chi_{ij}^{qlp}(\hat{\sigma}, g)] \right)^s \right], \quad (20)$$

де $\chi_{ij}^{qlp}(\hat{\sigma}, g)$ — кут між \mathbf{g} і \mathbf{g}^{qlp} (кут розсіяння на сходинці $\{q, l\}$ у процесі p), який залежить також від висоти сходинки ϵ_{ij}^{ql} . $Q_{ij}^{(s)qlp}$ залежить лише від *модуля* g відносної швидкості. Для процесів \odot і \otimes відношення g^{qlp}/g перетворюється в 1 і вираз набуває стандартного вигляду, відомого з кінетичних теорій Больмана й Енскога. Вираз для $Q_{ij}^{(s)qlp}$ можна подати у звичнішому вигляді [1, 2, 14], перейшовши до інтегрування за прицільним параметром b :

$$Q_{ij}^{(s)qlp}(g) \equiv 2\pi \int db b \left[1 - \left(\frac{g^{qlp}}{g} \cos[\chi_{ij}(b, g)] \right)^s \right], \quad (21)$$

де 2π походить від інтегрування за азимутальним кутом, а межі інтегрування для конкретних q, l і p можна визначити з умов, що накладаються функціями θ^p у ф. (20).

Для процесів \oplus та \ominus обов'язково $g^{qlp} \neq g$, тому виникає *новий тип* транспортного перерізу розсіяння, що не містить косинуса (див. дод. А):

$$\bar{Q}_{ij}^{(s)qlp}(g) \Big|_{p=\{\oplus; \ominus\}} \equiv (\sigma_{ij}^{ql})^2 \int d\hat{\sigma} \theta^p(\hat{g} \cdot \hat{\sigma}) (\hat{g} \cdot \hat{\sigma}) \left[1 - \left(\frac{g^{qlp}}{g} \right)^s \right], \quad (22)$$

де індекс s набуває лише *парних* додатніх значень. У кінетичних теоріях Больмана й Енскога його немає. Різниця в прямокутних дужках не залежить від $\hat{\sigma}$ (дод. В) і виноситься за інтеграл. Через відсутність косинуса такий транспортний переріз будемо називати *виродженням*. Деталі й результати обчислень введених перерізів розсіяння подано у додатку В, фф. (45)–(49).

Інтеграли за g називають *омега-інтегралами* [1, 2, 14]:

$$\Omega_{ij}^{(s,r)qlp}(T^{k0}) \equiv \left(\frac{k_B T^{k0}}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \int_0^\infty dg e^{-g^2} g^{2r+3} Q_{ij}^{(s)qlp}(g). \quad (23)$$

Як видно, це непарні за g моменти від транспортних перерізів розсіяння. Таке саме означення приймаємо і для інтегралів з $\bar{Q}_{ij}^{(s)qlp}$, які позначаємо $\bar{\Omega}_{ij}^{(s,r)qlp}(T^{k0})$ і називатимемо *виродженими* омега-інтегралами. Перший верхній індекс s в позначенні вказує на степінь другого внеску різниці у величинах $Q_{ij}^{(s)qlp}$ та $\bar{Q}_{ij}^{(s)qlp}$, а другий r — на степінь модуля g відносної швидкості.

Відповідно до будови лінеаризованого оператора зіткнень (3) звичайні парціальні омега-інтеграли $\Omega_{ij}^{(s,r)qlp}(T^{k0})$ утворюють характерну комбінацію²

$$\Omega_{ij}^{(s,r)}(T^{k0}) \equiv g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{c1})_{\mathbf{r}}^+ \Omega_{ij}^{(s,r)c1\ominus} + \sum_{q, \mathbf{a}} \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q \times \quad (24)$$

$$\times \left\{ \Omega_{ij}^{(s,r)ql\oplus} + e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \Omega_{ij}^{(s,r)ql\ominus} + e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \Omega_{ij}^{(s,r)ql\otimes} \right\},$$

яка містить внесок від зіткнення на твердій серцевині та внески від усіх процесів на сходинках. Об'єднання вироджених омега-інтегралів містить внески лише від процесів \oplus та \ominus :

$$\bar{\Omega}_{ij}^{(s,r)}(T^{k0}) \equiv \sum_{q, \mathbf{a}} \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q \left\{ \bar{\Omega}_{ij}^{(s,r)ql\oplus} + e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \bar{\Omega}_{ij}^{(s,r)ql\ominus} \right\}. \quad (25)$$

Виникає ще третій тип об'єднання, який будемо називати *комбінованим*:

$$\tilde{\Omega}_{ij}^{(s,r)}(T^{k0}) \equiv \sum_{q, \mathbf{a}} \sum_{l=1}^{K_{ij}^q} g_2^{ij,0}(\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q \bar{\epsilon}_{ij}^{ql} \left\{ \Omega_{ij}^{(s,r)ql\oplus} - e^{\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}} \Omega_{ij}^{(s,r)ql\ominus} \right\}. \quad (26)$$

Назва зумовлена тим, що тут входять звичайні парціальні омега-інтеграли, але лише від процесів \oplus та \ominus , які додатково домножуються на висоту сходинки.

Результати для цих величин подано нижче [див. фф. (28)–(33)]. Деталі розрахунку усіх парціальних омега-інтегралів подано у додатку С.

Результати для інтегральних дужок. Як вже зазначалося, інтегральні дужки як діагонального $\mathcal{B}_{ij;\nu}^{\prime;mn}$, так і недиагонального $\mathcal{B}_{ij;\nu}^{\prime\prime;mn}$,

²На відміну від кінетичної теорії Енскога [1,2], тут і нижче в означення “повних” омега-інтегралів (що стосуються всього БС потенціала) введено множниками значення парної функції розподілу в точках розриву потенціала.

типу є *лінійними комбінаціями* наведених вище об'єднань $\Omega_{ij}^{(s,r)}$, $\bar{\Omega}_{ij}^{(s,r)}$ та $\tilde{\Omega}_{ij}^{(s,r)}$. Для діагональних інтегральних дужок отримано такі результати:

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime;00} = 8n_i n_j M_j \Omega_{ij}^{(11)},$$

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime;01} = 8n_i n_j M_j^2 \left[\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} - \Omega_{ij}^{(12)} \right],$$

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime;10} = 8n_i n_j M_j^2 \left[\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} - \Omega_{ij}^{(12)} - \tilde{\Omega}_{ij}^{(11)} \right],$$

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime;11} = 8n_i n_j M_j^3 \left[\left(\frac{25}{4} + \frac{15}{2} m_{i/j}^2 \right) \Omega_{ij}^{(11)} - 5 \Omega_{ij}^{(12)} + \Omega_{ij}^{(13)} + 2m_{i/j} \Omega_{ij}^{(22)} - \frac{5}{2} \tilde{\Omega}_{ij}^{(11)} + \tilde{\Omega}_{ij}^{(12)} + \frac{7}{2} m_{i/j} \tilde{\Omega}_{ij}^{(22)} \right];$$

$$\mathcal{B}_{ij;5/2}^{\prime;00} = 8n_i n_j M_j^2 \left[\frac{10}{3} m_{i/j} \Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(22)} - \frac{1}{3} \bar{\Omega}_{ij}^{(22)} \right];$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;0n} = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;10} = 0,$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;11} = 8n_i n_j M_j^2 [2m_{i/j} \Omega_{ij}^{(11)} + \bar{\Omega}_{ij}^{(22)}],$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;12} = 8n_i n_j M_j^3 [10m_{i/j} \Omega_{ij}^{(11)} - 4m_{i/j} \Omega_{ij}^{(12)} + 5\bar{\Omega}_{ij}^{(22)} - \bar{\Omega}_{ij}^{(23)}],$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;20} = 0,$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;21} = 8n_i n_j M_j^3 [10m_{i/j} \Omega_{ij}^{(11)} - 4m_{i/j} \Omega_{ij}^{(12)} - 4m_{i/j} \tilde{\Omega}_{ij}^{(11)} - \bar{\Omega}_{ij}^{(43)}],$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime;22} = 8n_i n_j M_j^4 \left[(50m_{i/j} + 20m_{i/j}^3) \Omega_{ij}^{(11)} - 40m_{i/j} \Omega_{ij}^{(12)} + 8m_{i/j} \Omega_{ij}^{(13)} + 8m_{i/j}^2 \Omega_{ij}^{(22)} - 20m_{i/j} \tilde{\Omega}_{ij}^{(11)} + 8m_{i/j} \tilde{\Omega}_{ij}^{(12)} - (25 + 14m_{i/j}^2) \bar{\Omega}_{ij}^{(22)} + 5\bar{\Omega}_{ij}^{(23)} - 5\bar{\Omega}_{ij}^{(43)} + \bar{\Omega}_{ij}^{(44)} \right].$$

Для недиагональних дужок отримано такі результати:

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime\prime;00} = 8n_i n_j \sqrt{M_i M_j} [-\Omega_{ij}^{(11)}],$$

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime\prime;01} = 8n_i n_j \sqrt{M_i M_j^3} \left[-\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(12)} \right],$$

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime\prime;10} = 8n_i n_j \sqrt{M_i^3 M_j} \left[-\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(12)} + \tilde{\Omega}_{ij}^{(11)} \right],$$

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{\prime\prime;11} = 8n_i n_j \sqrt{M_i^3 M_j^3} \left[-\frac{55}{4} \Omega_{ij}^{(11)} + 5 \Omega_{ij}^{(12)} - \Omega_{ij}^{(13)} + 2 \Omega_{ij}^{(22)} + \frac{5}{2} \tilde{\Omega}_{ij}^{(11)} - \tilde{\Omega}_{ij}^{(12)} + \frac{7}{2} \bar{\Omega}_{ij}^{(22)} \right];$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{ij;5/2}^{\prime\prime;00} &= 8n_i n_j M_i M_j \left[-\frac{10}{3}\Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(22)} - \frac{1}{3}\bar{\Omega}_{ij}^{(22)} \right]; \\
\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;0n} &= 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \\
\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;10} &= 0, \\
\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;11} &= 8n_i n_j M_i M_j \left[-2\Omega_{ij}^{(11)} + \bar{\Omega}_{ij}^{(22)} \right], \\
\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;12} &= 8n_i n_j M_i M_j^2 \left[-10\Omega_{ij}^{(11)} + 4\Omega_{ij}^{(12)} + 5\bar{\Omega}_{ij}^{(22)} - \bar{\Omega}_{ij}^{(23)} \right], \\
\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;20} &= 0, \\
\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;21} &= 8n_i n_j M_i^2 M_j \left[-10\Omega_{ij}^{(11)} + 4\Omega_{ij}^{(12)} + 4\tilde{\Omega}_{ij}^{(11)} - \bar{\Omega}_{ij}^{(43)} \right], \\
\mathcal{B}_{ij;1/2}^{\prime\prime;22} &= 8n_i n_j M_i^2 M_j^2 \left[-70\Omega_{ij}^{(11)} + 40\Omega_{ij}^{(12)} - 8\Omega_{ij}^{(13)} + 8\Omega_{ij}^{(22)} + \right. \\
&\quad \left. + 20\tilde{\Omega}_{ij}^{(11)} - 8\tilde{\Omega}_{ij}^{(12)} - \right. \\
&\quad \left. - 39\bar{\Omega}_{ij}^{(22)} + 5\bar{\Omega}_{ij}^{(23)} - 5\bar{\Omega}_{ij}^{(43)} + \bar{\Omega}_{ij}^{(44)} \right].
\end{aligned}$$

Тут, у порівнянні з формулами для загального випадку (дод. В), взято до уваги, що комбінації вироджених омега-інтегралів $\bar{\Omega}_{ij}^{(2,1)}$ і $\bar{\Omega}_{ij}^{(4,2)}$ перетворюються в нуль, фф. (30), (31). З отриманих виразів можна одержати, як частковий випадок, відповідні результати для односортної системи з БС потенціалом, а також M -сортні результати для прямокутної ями і твердих кульок [18].

Ще варто звернути увагу, що завдяки незавершеності парних процесів \oplus та \ominus наведені інтегральні дужки не задовольняють співвідношення симетрії, тобто, $\mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mm} \neq \mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn}$, хоч для дужок больцманівського чи енскогівського лінеаризованого оператора зіткнень має місце рівність.

Результати для об'єднань омега-інтегралів. Кінцеві вирази для потрібних нам транспортних перерізів розсіяння та омега-інтегралів, що стосуються окремих процесів, наведено у додатках В та С. За їх допомогою наведемо тут результати для об'єднань звичайних (24), вироджених (25) та комбінованих (26) омега-інтегралів. Вони виглядають подібно, тому їх зручно подати за допомогою такої характерної конструкції [13]:

$$\Lambda_{n;\alpha_c \alpha_q}^{ij} [\Xi(\bar{\epsilon}_{ij})] \equiv \alpha_c (\sigma_{ij}^{c1})^n g_2^{ij} (\sigma_{ij}^{c1})_{\mathbf{r}}^+ + \sum_q \sum_{l, \mathbf{r}, \mathbf{a}} K_{ij}^q \alpha_q (\sigma_{ij}^{ql})^n g_2^{ij} (\sigma_{ij}^{ql})_{\mathbf{r}}^q \Xi(\bar{\epsilon}_{ij}^{ql}), \quad (27)$$

де для наведених нижче виразів перший параметр $n = 2$, наступний набуває значень $\alpha_c = \{0; 1\}$ і $\alpha_q = 1$. Вони визначають степінь σ_{ij}^{ql} , наявність внеску від твердої серцевини та від сходинок. В аргументі функції Ξ в самій конструкції *не вказуємо* верхніх індексів біля $\bar{\epsilon}_{ij}$ тому, що за ними проводиться підсумовування.

Для звичайних омега-інтегралів отримано такі результати:

$$\Omega_{ij}^{\begin{bmatrix} (1,1) \\ (1,2) \\ (1,3) \\ (2,2) \end{bmatrix}} = \left(\frac{k_B T^{k0}}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 12 \\ 2 \end{bmatrix} \pi \Lambda_{2;11}^{ij} \left[\Phi_{\Omega}^{\begin{bmatrix} (1,1) \\ (1,2) \\ (1,3) \\ (2,2) \end{bmatrix}}(\bar{\epsilon}_{ij}) \right]. \quad (28)$$

Їх записано для 4-х пар індексів так, що позиції першої пари у лівій частині відповідають перші позиції у високих прямокутних дужках у правій частині, другій — другі і т.д. Всі омега-інтеграли містять внески від твердої серцевини (перша з двох одиниць біля $\Lambda_{2;11}^{ij}$), а характерні функції мають вигляд:

$$\Phi_{\Omega}^{\begin{bmatrix} (1,1) \\ (1,2) \\ (1,3) \\ (2,2) \end{bmatrix}}(\bar{\epsilon}) \equiv \begin{bmatrix} e^{\bar{\epsilon}} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} K_1\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}\right) \\ e^{\bar{\epsilon}} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} - \frac{1}{6}\bar{\epsilon}^2 - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} \left[K_1\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}\right) + \frac{1}{6}\bar{\epsilon} K_0\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}\right) \right] \\ e^{\bar{\epsilon}} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} - \frac{1}{4}\bar{\epsilon}^2 - \frac{1}{24}\bar{\epsilon}^3 - \\ \quad - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} \left[\left(1 + \frac{1}{24}\bar{\epsilon}^2\right) K_1\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}\right) + \frac{5}{24}\bar{\epsilon} K_0\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}\right) \right] \\ e^{\bar{\epsilon}} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} + \frac{1}{4}\bar{\epsilon}^2 - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} K_1\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}\right) \end{bmatrix}, \quad (29)$$

де $K_{\nu}(z)$ — модифікована функція Бесселя другого роду [17], див. дод. D. Зауважмо, що цілочисельні коефіцієнти у високих прямокутних дужках ф. (28) такі самі, як у випадку моделі твердих кульок [1, 2].

Результати для вироджених омега-інтегралів $\bar{\Omega}_{ij}^{(2,r)}|_{r=\{1;2;3\}}$ і $\bar{\Omega}_{ij}^{(4,r)}|_{r=\{2;3;4\}}$ можна подати за допомогою подібної формули, яка, однак, не містить внеску від твердої серцевини (індекс 0 в $\Lambda_{2;01}^{ij}$):

$$\bar{\Omega}_{ij}^{(s,r)} = \left(\frac{k_B T^{k0}}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \pi \Lambda_{2;01}^{ij} \left[\bar{\Phi}_{\Omega}^{(s,r)}(\bar{\epsilon}_{ij}) \right], \quad (30)$$

де потрібні нам функції дорівнюють:

$$\bar{\Phi}_{\Omega}^{\begin{bmatrix} (2,1) \\ (2,2) \\ (2,3) \end{bmatrix}}(\bar{\epsilon}) \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2 \\ 2\bar{\epsilon}^2 + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^3 \end{bmatrix}, \quad \bar{\Phi}_{\Omega}^{\begin{bmatrix} (4,2) \\ (4,3) \\ (4,4) \end{bmatrix}}(\bar{\epsilon}) \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 2\bar{\epsilon}^2 + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^3 \\ 12\bar{\epsilon}^2 + 4\bar{\epsilon}^3 + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^4 \end{bmatrix}. \quad (31)$$

На відміну від попереднього випадку, тут характерні функції для вироджених омега-інтегралів є многочленами.

Для комбінованих омега-інтегралів $\tilde{\Omega}_{ij}^{(1,r)}|_{r=\{1;2\}}$ результат виглядає так само, як ф. (30):

$$\tilde{\Omega}_{ij}^{(1,r)} = \left(\frac{k_B T^{k0}}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \pi \Lambda_{2;01}^{ij} [\tilde{\Phi}_{\Omega}^{(1,r)}(\bar{\epsilon}_{ij})], \quad (32)$$

у якій в аргументі конструкції $\Lambda_{2;01}^{ij}$ треба підставити такі функції:

$$\tilde{\Phi}_{\Omega}^{[(1,1)](1,2)}(\bar{\epsilon}) \equiv \left[-\frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2 \right. \\ \left. -\frac{3}{2}\bar{\epsilon}^2 - \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^3 + \frac{1}{4}\bar{\epsilon}^3 e^{\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} K_1\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}\right) \right]. \quad (33)$$

У фф. (28)–(33) об'єднання омега-інтегралів записано у вигляді явних функцій від параметрів БС потенціла. Таким чином, вони задають інтегральні дужки, наведені на сс. 11–12, як *функції висот сходинок, їхніх розташувань і температури*. Далі дужки використовуються як матричні коефіцієнти для відшукування поправок першого порядку до одночастинкових функцій розподілу в наближенні перших многочленів Соніна-Лягера.

З цих результатів можна отримати відомі часткові випадки: для односортного випадку БС потенціала, а також для суміші та односортної системи частинок з потенціалом прямокутної ями. У літературі [3, 5, 6, 8, 9, 12] наведено лише *кінцеві* формули для інтегральних дужок, які отримуються від додавання відповідних омега-інтегралів за формулами, подібними до наведених на сс. 11–12. Тому наші результати, будучи виражені через функції розсіяння, мають ту перевагу, що повніше розкривають внутрішню структуру інтегральних дужок.

4. Висновки

Ми розглянули лінеаризовану кінетичну теорію для густої газової суміші з багатосходиновою взаємодією між частинками, яка отримується з відповідної нелінійної теорії [13, 15, 16]. Основну увагу звернуто на лінійні інтегральні рівняння для поправок першого порядку до одночастинкових функцій розподілу, які в найнижчих наближеннях за многочленами Соніна-Лягера зведено до систем лінійних алгебричних рівнянь. Коефіцієнти останніх — інтегральні дужки — виражено через відповідні, і широко вживані в кінетичній теорії [1, 2, 14], функції розсіяння (омега-інтеграли).

Кінцеві вирази для усіх необхідних функцій розсіяння одержано в аналітичному вигляді. У порівнянні з випадками кінетичних теорій Больцмана чи Енскога виявлено несиметричність інтегральних дужок, а також появу нових типів омега-інтегралів, пов'язану із зміною модуля відносної швидкості двох частинок у парних процесах опускання і підйому на сходинах.

Отримані результати заповнюють раніше залишені прогалини в кінетичних теоріях густих систем з розривними потенціалами (прямокутної ями і багатосходинової функції) і можуть відігравати роль кращого впорядкування відомостей із цих теорій. Особливо заслуговують уваги, на наш погляд, явні залежності омега-інтегралів від висот сходинок та від температури.

Наведені співвідношення дають змогу безпосередньо розраховувати коефіцієнти переносу як модельних, так і реальних, густих газових сумішей, враховуючи явно притягання між молекулами.

А. Розрахунок інтегральних дужок

Тут послідовно описано розрахунок матричних елементів лінеаризованого оператора зіткнень, побудованих на наборах многочленів Соніна-Лягера $\{S_{\nu}\}$.

В наближеннях 2-х, 1-го, 3-х і 2-х многочленів для функцій $\{A, B, H, E\}$, ф. (10), нам потрібні парціальні інтегральні дужки $\mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn;qlp}$, ф. (19), з такими значеннями індексів ν , m та n :

$$\nu = \frac{3}{2}: m, n = \{0; 1\}, \quad \nu = \frac{5}{2}: m, n = \{0\}, \quad \nu = \frac{1}{2}: m, n = \{0; 1; 2\}.$$

Разом це 28 величин. Через таку кількість ми лише опишемо послідовність дій, необхідних для того, щоб виразити їх через омега-інтеграли. Розрахунок можна розбити на три окремі етапи: підготовчий, проведення інтегрувань і формування омега-інтегралів. Ми спочатку наводимо загальний опис розрахунків, а потім ілюструємо його на конкретному прикладі.

А.1. Загальний опис розрахунку

Перетворення проводиться у системі центра мас. Перейдімо під інтегралом у ф. (19) до *безрозмірних* швидкості центра мас $\mathcal{G} \equiv \tilde{m}_{i+j}^{1/2} [M_i \mathbf{c}_i + M_j \mathbf{c}_j]$ та відносної швидкості $\mathbf{g} \equiv \tilde{\mu}_{ij}^{1/2} [\mathbf{c}_j - \mathbf{c}_i]$ за допомогою співвідношень:

$$\mathbf{c}_i = \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} - M_j \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \mathbf{g}, \quad \mathbf{c}_j = \tilde{m}_{i+j}^{-1/2} \mathcal{G} + M_i \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \mathbf{g},$$

де $\tilde{m}_{i+j} \equiv (m_i + m_j)/(2k_B T^{k_0})$, $\tilde{\mu}_{ij} \equiv \mu_{ij}/(2k_B T^{k_0})$, $M_k \equiv m_k/(m_i + m_j)$ із $k = \{i; j\}$ та $\mu_{ij} \equiv m_i m_j / (m_i + m_j)$ — зведена маса. Якобіан переходу дорівнює $\tilde{m}_{i+j}^{-3/2} \tilde{\mu}_{ij}^{-3/2}$ і ми отримуємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn:qlp} &= -(\sigma_{ij}^{ql})^2 g_2^{ij,0} (\sigma_{ij}^{ql})^{\gamma_p} n_i n_j \pi^{-3} \tilde{\mu}_{ij}^{-1/2} \times \\ &\times \int d\mathcal{G} d\mathbf{g} d\hat{\sigma} g_\sigma \theta^p(g_\sigma) e^{-g^2 - g^2} \times \\ &\times \left[S_\nu^m([\mathbf{C}_k^{qlp}]^2) \mathbf{C}_k^{qlp[\nu]} \odot S_\nu^m(C_i^2) \mathbf{C}_i^{[\nu]} - S_\nu^m(C_k^2) \mathbf{C}_k^{[\nu]} \odot S_\nu^m(C_i^2) \mathbf{C}_i^{[\nu]} \right]. \end{aligned} \quad (34)$$

Етап 1. Формування виразів для перетворень. Інтегральні дужки можна шукати у загальному випадку, не конкретизуючи, чи це дужки діагонального типу ($k = l$), чи недіагонального ($k = n$). Для цього \mathbf{C}_k записуємо у такій формі:

$$\mathbf{C}_k = \alpha \mathcal{G} + \beta \mathbf{g}, \quad \text{де } (\alpha, \beta) = \begin{cases} (M_i^{1/2}, -M_j^{1/2}), & k = l, \\ (M_j^{1/2}, M_i^{1/2}), & k = n. \end{cases} \quad (35)$$

Загальні коефіцієнти α і β охоплюють обидва випадки для k й будуть конкретизовані наприкінці. Цілком подібно

$$\mathbf{C}_k^{qlp} = \alpha \mathcal{G} + \beta \mathbf{g}^{qlp}, \quad (36)$$

де α і β ті ж самі, що й вище.

Зуважмо, що функціональна форма першого і другого доданків у прямокутних дужках ф. (34) однакова. Вираз для \mathbf{C}_k можна отримати з виразу для \mathbf{C}_k^{qlp} , замінивши \mathbf{g}^{qlp} на \mathbf{g} , тому досить перетворити не всю ф. (34), а лише внесок із \mathbf{C}_k^{qlp} . Доданок із \mathbf{C}_k завжди можна відтворити, підставивши \mathbf{g} на місце \mathbf{g}^{qlp} . Отже, будемо шукати такий інтеграл:

$$\int d\mathcal{G} d\mathbf{g} d\hat{\sigma} g_\sigma \theta^p(g_\sigma) e^{-g^2 - g^2} S_\nu^m([\mathbf{C}_k^{qlp}]^2) \mathbf{C}_k^{qlp[\nu]} \odot S_\nu^n(C_i^2) \mathbf{C}_i^{[\nu]}, \quad (37)$$

де, згідно ф. (35) для \mathbf{C}_i ($k = l$), маємо:

$$\mathbf{C}_i = M\mathcal{G} - m\mathbf{g}. \quad (38)$$

Тут тимчасово позначено $M \equiv M_i^{1/2}$ та $m \equiv M_j^{1/2}$. У ф. (37) скалярні добутки для різних ν дорівнюють:

$$\begin{aligned} \nu = \frac{3}{2}: & \quad S_{3/2}^m([\mathbf{C}_k^{qlp}]^2) \mathbf{C}_k^{qlp} \cdot S_{3/2}^n(C_i^2) \mathbf{C}_i; \\ \nu = \frac{5}{2}: & \quad S_{5/2}^m([\mathbf{C}_k^{qlp}]^2) [\mathbf{C}_k^{qlp}] \circ [\mathbf{C}_k^{qlp}] : S_{5/2}^n(C_i^2) \mathbf{C}_i \circ \mathbf{C}_i; \\ \nu = \frac{1}{2}: & \quad S_{1/2}^m([\mathbf{C}_k^{qlp}]^2) \times S_{1/2}^n(C_i^2). \end{aligned}$$

Подальші алгебричні перетворення полягають у тому, що у цих добутках виражаємо \mathbf{C}_k^{qlp} та \mathbf{C}_i через \mathcal{G} , \mathbf{g} та \mathbf{g}^{qlp} за допомогою фф. (36) та (38) і перемножуємо. Для кожного ν і пари (m, n) отримуємо набір доданків, кожен із яких може містити парні степені \mathcal{G} , \mathbf{g} та \mathbf{g}^{qlp} , а також скалярні добутки відповідних векторів: $\mathcal{G} \cdot \mathbf{g}$, $\mathcal{G} \cdot \mathbf{g}^{qlp}$ і $\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^{qlp}$. Серед цих доданків можна відкинути ті, що не містять \mathbf{g}^{qlp} , бо вони взаємно знищуються зі своїми відповідниками від внеску, що походить від \mathbf{C}_k у ф. (34). Ті доданки, що залишились, треба проінтегрувати за \mathcal{G} , \mathbf{g} і $\hat{\sigma}$.

Етап 2. Інтегрування за $\hat{\mathcal{G}}$ та \mathcal{G} . При інтегруванні за $\hat{\mathcal{G}}$ доданки, непарні відносно вектора \mathcal{G} , перетворюються в нуль, тому їх відкидаємо. Для парних степенів використовуємо формули:

$$\int d\hat{\mathcal{G}} \begin{bmatrix} 1 \\ \mathcal{G}\mathcal{G} \end{bmatrix} = 4\pi \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{3}\mathcal{G}^2\mathbf{1} \end{bmatrix},$$

$$\int d\hat{\mathcal{G}} (\mathbf{g} \cdot \mathcal{G})^2 \mathcal{G}\mathcal{G} = 4\pi \times \frac{1}{15} \mathcal{G}^4 [g^2\mathbf{1} + 2\mathbf{g}\mathbf{g}].$$

Останній інтеграл зустрічається лише в одному випадку із $\nu = 1/2$, $(m, n) = (2, 2)$. Спільний множник 4π виносимо. Інтегрування за модулем \mathcal{G} зводиться до гамма-функції:

$$\int_0^\infty d\mathcal{G} e^{-\mathcal{G}^2} \mathcal{G}^k = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right).$$

Досі описані перетворення ніяк не зв'язані з динамікою парного зіткнення, а визначаються комбінаціями многочленів S_ν . Після інтегрувань у виразах залишаються доданки, що містять степені скалярного добутку $\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^{qlp}$ або степені квадрата $(\mathbf{g}^{qlp})^2$. Останні важливі лише для процесів \oplus та \ominus . Для \odot і \otimes має місце $\mathbf{g}^{qlp} = \mathbf{g}$, тому відповідні внески із $(\mathbf{g}^{qlp})^2$ відкидаємо.

Етап 3. Вираження через функції розсіяння. Запишімо скалярний добуток через кут розсіяння χ_{ij}^{qlp} :

$$\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^{qlp} = g g^{qlp} \cos \chi_{ij}^{qlp}(\hat{\sigma}, \mathbf{g}).$$

Далі з кожного доданка відтворюємо відповідний внесок, що походить від від'ємника з \mathbf{C}_k у прямокутних дужках ф. (34), підставивши \mathbf{g} замість \mathbf{g}^{qlp} і 1 замість $\cos \chi_{ij}^{qlp}$.

Для процесів \odot та \otimes одержимо звичні в кінетичних теоріях Больцмана чи Енскога [1, 2, 14] конструкції $[1 - \cos^s \chi_{ij}^{qlp}]$. Для процесів \oplus та \ominus завдяки $g^{qlp} \neq g$ біля косинуса з'являється відношення g^{qlp}/g , тому отримуються конструкції $[1 - ((g^{qlp}/g) \cos \chi_{ij}^{qlp})^s]$, характерні для *незавершених* траєкторій розсіяння.

На цьому етапі залишилися інтегрування за \mathbf{g} та $\hat{\sigma}$. У додатку В показано, що результати інтегрування будь-якого доданка за $\hat{\sigma}$ *не залежать* від орієнтації \hat{g} , а лише від модуля g . Тоді інтегрування будь-якого доданка за \hat{g} (проведене після інтегрування за $\hat{\sigma}$) дасть 4π . Таким чином усі внески зводяться до послідовних інтегрувань за взаємною орієнтацією $\hat{\sigma}$ частинок [транспортних перерізів розсіяння, ф. (20) і (22)] і за модулем відносної швидкості g [омега-інтегралів, ф. (23)].

А.2. Розрахунок $\mathcal{B}_{ij;5/2}^{k;00;qlp}$

Проілюструймо описані етапи на прикладі розрахунку матричних елементів для $\nu = 5/2$. Тут ми обмежуємося лише нульовим многочленом $S_{5/2}^0(C^2) = 1$, тому необхідно розглянути інтегрування у ф. (37) для $[\mathbf{C}_k^{qlp}]^\circ [\mathbf{C}_k^{qlp}] : \mathbf{C}_i^\circ \mathbf{C}_i$.

Етап 1. Згортка тензорів дає:

$$[\mathbf{C}_k^p]^\circ [\mathbf{C}_k^p] : \mathbf{C}_i^\circ \mathbf{C}_i = (\mathbf{C}_k^p \cdot \mathbf{C}_i)^2 - \frac{1}{3} [\mathbf{C}_k^p]^2 C_i^2,$$

тут і нижче з верхніх індексів qlp залишено лише останній — індекс процесу. З фф. (36) і (38) легко знаходимо, що

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_k^p \cdot \mathbf{C}_i &= \alpha M \mathcal{G}^2 - \alpha m \mathcal{G} \cdot \mathbf{g} + \beta M \mathcal{G} \cdot \mathbf{g}^p - \beta m \mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^p, \\ [\mathbf{C}_k^p]^2 &= \alpha^2 \mathcal{G}^2 + \beta^2 \mathbf{g}^2 + 2\alpha\beta \mathcal{G} \cdot \mathbf{g}^p, \\ C_i^2 &= M^2 \mathcal{G}^2 + m^2 \mathbf{g}^2 - 2Mm \mathcal{G} \cdot \mathbf{g}. \end{aligned}$$

Підставивши ці вирази у попередню формулу, отримаємо:

$$\begin{aligned} [\mathbf{C}_k^p]^\circ [\mathbf{C}_k^p] : \mathbf{C}_i^\circ \mathbf{C}_i &= \frac{2}{3} \alpha^2 M^2 \mathcal{G}^4 - \frac{1}{3} \alpha^2 m^2 \mathcal{G}^2 \mathbf{g}^2 - \frac{1}{3} \beta^2 M^2 \mathcal{G}^2 \mathbf{g}^p{}^2 - \\ &- \frac{1}{3} \beta^2 m^2 \mathbf{g}^2 \mathbf{g}^p{}^2 + \alpha^2 m^2 (\mathcal{G} \cdot \mathbf{g})^2 + \beta^2 M^2 (\mathcal{G} \cdot \mathbf{g}^p)^2 - \\ &- \frac{2}{3} \alpha\beta Mm (\mathcal{G} \cdot \mathbf{g}) (\mathcal{G} \cdot \mathbf{g}^p) - 2\alpha\beta Mm (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^p) + \beta^2 m^2 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^p)^2 + [\dots]. \end{aligned}$$

де $g^{p2} \equiv [\mathbf{g}^p]^2$, а через $[\dots]$ позначено внески, непарні за \mathcal{G} . 1-й, 2-й і 5-й доданки не містять \mathbf{g}^p , тому їх *відкидаємо*. Решту треба підставити у ф. (37) і проінтегрувати за швидкостями.

Етап 2. Інтегрування попереднього виразу за $\hat{\mathcal{G}}$ дає:

$$4\pi \left\{ -\frac{1}{3} \beta^2 m^2 \mathbf{g}^2 \mathbf{g}^p{}^2 - \frac{20}{9} \alpha\beta Mm \mathcal{G}^2 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^p) + \beta^2 m^2 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^p)^2 \right\}.$$

Інтегруючи за \mathcal{G} , отримуємо:

$$4\pi \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left\{ -\frac{1}{3} \beta^2 m^2 \mathbf{g}^2 \mathbf{g}^p{}^2 - \frac{10}{3} \alpha\beta Mm g g^p \cos \chi_{ij}^p + \beta^2 m^2 \mathbf{g}^2 \mathbf{g}^p{}^2 \cos^2 \chi_{ij}^p \right\},$$

де $(\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^p)$ виражено через $\cos \chi_{ij}^p$.

Етап 3. З попереднього виразу відтворюємо внесок, що походить від доданка із \mathbf{C}_k у прямокутних дужках ф. (34), підставивши \mathbf{g} замість \mathbf{g}^p і 1 замість $\cos \chi_{ij}^p$. Тоді одержимо:

$$\begin{aligned} &- 4\pi \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left\{ -\frac{1}{3} \beta^2 m^2 g^4 [1 - (g^p/g)^2] - \right. \\ &\left. - \frac{10}{3} \alpha\beta Mm g^2 [1 - (g^p/g) \cos \chi_{ij}^p] + \beta^2 m^2 g^4 [1 - ((g^p/g) \cos \chi_{ij}^p)^2] \right\}. \end{aligned}$$

Інтегрування за \hat{g} (після проведеного інтегрування за $\hat{\sigma}$) дає 4π і тоді коефіцієнт перед фігурними дужками остаточно дорівнює $4\pi^{5/2}$. Інтеграл за $\hat{\sigma}$ та g від цих виразів утворюють величини (20) чи (22) та (23) і ми отримуємо 5-й за порядком матричний елемент, поданий у §А.3.

А.3. Результати для інтегральних дужок

Остаточні вирази мають такий загальний вигляд [13]:

$$\mathcal{B}_{ij;\nu}^{k;mn;qlp} = 8n_i n_j [\dots],$$

де $[\dots]$ позначає суми парціальних омега-інтегралів $\Omega_{ij}^{(s,r)qlp}$. Нижче ми подаємо результати для цих сум, де до кожного омега-інтеграла треба дописати верхні індекси qlp . Наводимо суми для 4-х матричних елементів з індексом $\nu = 3/2$, для 1-го з $\nu = 5/2$ і для 6-ти ненульових з індексом $\nu = 1/2$:

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{k;00;qlp} : \beta m [-\Omega_{ij}^{(11)}],$$

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{k;01;qlp} : \beta m^3 \left[-\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(12)} \right],$$

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{k;10;qlp} : \beta^3 m \left[-\frac{5}{2} \Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(12)} + p\bar{\epsilon} \Omega_{ij}^{(11)} - \frac{5}{2} \phi \bar{\Omega}_{ij}^{(21)} \right],$$

$$\mathcal{B}_{ij;3/2}^{k;11;qlp} : \beta^3 m^3 \left[-\left(\frac{25}{4} + \frac{15}{2} \phi^2\right) \Omega_{ij}^{(11)} + 5\Omega_{ij}^{(12)} - \Omega_{ij}^{(13)} + 2\phi \Omega_{ij}^{(22)} + \right.$$

$$+ p\bar{\epsilon}\left(\frac{5}{2}\Omega_{ij}^{(11)} - \Omega_{ij}^{(12)}\right) - \frac{25}{4}\phi\bar{\Omega}_{ij}^{(21)} + \frac{7}{2}\phi\bar{\Omega}_{ij}^{(22)}];$$

$$\mathcal{B}_{ij;5/2}^{k;00;qlp} : \beta^2 m^2 \left[-\frac{10}{3}\phi\Omega_{ij}^{(11)} + \Omega_{ij}^{(22)} - \frac{1}{3}\bar{\Omega}_{ij}^{(22)}\right];$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{k;0n;qlp} : 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{k;10;qlp} : \beta^2 [-\bar{\Omega}_{ij}^{(21)}],$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{k;11;qlp} : \beta^2 m^2 \left[-2\phi\Omega_{ij}^{(11)} - \frac{3}{2}\bar{\Omega}_{ij}^{(21)} + \bar{\Omega}_{ij}^{(22)}\right],$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{k;12;qlp} : \beta^2 m^4 \left[-10\phi\Omega_{ij}^{(11)} + 4\phi\Omega_{ij}^{(12)} - \frac{15}{4}\Omega_{ij}^{(21)} + 5\bar{\Omega}_{ij}^{(22)} - \bar{\Omega}_{ij}^{(23)}\right],$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{k;20;qlp} : \beta^4 \left[-5\bar{\Omega}_{ij}^{(21)} + \bar{\Omega}_{ij}^{(42)}\right],$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{k;21;qlp} : \beta^4 m^2 \left[-10\phi\Omega_{ij}^{(11)} + 4\phi\Omega_{ij}^{(12)} + 4\phi p\bar{\epsilon}\Omega_{ij}^{(11)} - \left(\frac{15}{2} + 5\phi^2\right)\bar{\Omega}_{ij}^{(21)} + \frac{3}{2}\bar{\Omega}_{ij}^{(42)} - \bar{\Omega}_{ij}^{(43)}\right],$$

$$\mathcal{B}_{ij;1/2}^{k;22;qlp} : \beta^4 m^4 \left[-(50\phi + 20\phi^3)\Omega_{ij}^{(11)} + 40\phi\Omega_{ij}^{(12)} - 8\phi\Omega_{ij}^{(13)} + 8\phi^2\Omega_{ij}^{(22)} + 20\phi p\bar{\epsilon}\Omega_{ij}^{(11)} - 8\phi p\bar{\epsilon}\Omega_{ij}^{(12)} - 25\left(\frac{3}{4} + \phi^2\right)\bar{\Omega}_{ij}^{(21)} - (25 + 14\phi^2)\bar{\Omega}_{ij}^{(22)} + 5\bar{\Omega}_{ij}^{(23)} + \frac{15}{4}\bar{\Omega}_{ij}^{(42)} - 5\bar{\Omega}_{ij}^{(43)} + \bar{\Omega}_{ij}^{(44)}\right].$$

Щоб одержати вирази для діагональних інтегральних дужок $k = l$, треба підставити $\phi = -m_{i/j}$, а для недіагональних — $\phi = 1$.

В основному тексті на сс. 11–12 наведено діагональні та недіагональні інтегральні дужки, що стосуються всього БС потенціала. Їх отримано, додавши внески від кожного можливого процесу p на кожній сходинці q . Враховано, що сумарні вироджені омега-інтеграли $\bar{\Omega}_{ij}^{(22)}$ і $\bar{\Omega}_{ij}^{(42)}$, знайдені за ф. (25), перетворюються в нуль, див. фф. (30) і (31).

Зауважмо також, що наведені вирази відрізняються від поданих раніше [13] завдяки тому, що тут ми прийняли *методологічно правильні* означення для транспортних перерізів розсіяння (20) та (22), які містять відношення g^{qlp}/g . Відмінність проявляється лише в доданках типу $\tilde{\Omega}$ та $\tilde{\bar{\Omega}}$.

В. Транспортні перерізи розсіяння

Тут подано детальний розрахунок звичайних $Q_{ij}^{(s)qlp}|_{s=\{1,2\}}$ та вироджених $\bar{Q}_{ij}^{(s)qlp}|_{s=\{2,4\}}$ транспортних перерізів, заданих фф. (20) і (22).

Спочатку зробимо зауваження стосовно природи транспортних перерізів розсіяння. Головна характеристика парного *завершеного*³ зіткнення частинок i та j — це кут розсіяння $\chi_{ij}(b, g)$, який залежить від прицільного параметра b та модуля g відносної швидкості. Як відомо [1, 2, 14], величина g при завершеному зіткненні не змінюється: $g' = g$. Транспортні перерізи — це інтегральні характеристики процесу розсіяння, свого роду “моменти” від $\cos \chi_{ij}$ вигляду $[1 - (\cos \chi_{ij})^s]$, див. [1, 2, 14]. Через те, що модуль відносної швидкості в процесах \oplus та \ominus на сходинках БС потенціала *не зберігається* $g^{qlp} \neq g$, тому у ф. (20) замість косинуса виникає комбінована величина $(g^{qlp}/g) \cos \chi_{ij}^{qlp}$. В той же час, вироджений транспортний переріз (22) [для \oplus та \ominus] характеризує *чистий ефект* від зміни самого лише модуля відносної швидкості тоді, як кут розсіяння χ_{ij}^{qlp} не відіграє тут ролі.

Введімо тепер характерні функції, які використовуватимемо далі. Зокрема, функції $\theta^p(\hat{g} \cdot \hat{\sigma})$ у фф. (20) і (22) задають умови настання процесів $p = \{\odot; \oplus; \ominus; \otimes\}$ і виражаються через сходинкову функцію $\theta(x)$ (яка перетворюється в 0 для $x < 0$ і дорівнює 1 для $x \geq 0$). Залежність θ^p від модуля g означає наступне:

$$\theta^\odot(g) = \theta^\oplus(g) \equiv \theta(g), \quad \theta^\ominus(g) \equiv \theta(g - \sqrt{\bar{\epsilon}}), \quad \theta^\otimes(g) \equiv \theta(g)\theta(\sqrt{\bar{\epsilon}} - g),$$

де $\bar{\epsilon} \equiv \epsilon/(k_B T^{k_0})$ — безрозмірна висота сходинки.

Транспортні перерізи виражаються через свої характерні функції, позначені у роботі [13] як j_n^p та j_m^p . Вони мають вигляд:

$$j_n^\odot(g) = j_n^\oplus(g) \equiv \frac{1}{n}, \quad j_n^\ominus(g) \equiv \frac{1}{n}[1 - \bar{v}^n], \quad j_n^\otimes(g) \equiv \frac{1}{n}[\theta^\otimes(g) + \theta^\ominus(g)\bar{v}^n], \quad (39)$$

де $\bar{v} \equiv \sqrt{\bar{\epsilon}}/g$. Важливо зауважити, що j_n^\otimes містить функції θ^\otimes і θ^\ominus . Для обмінних процесів можна записати $j_n^p(g)|_{\{\oplus; \ominus\}} = \frac{1}{n}[1 - \delta_{\ominus,p}\bar{v}^n]$, де $\delta_{\ominus,p}$ — символ Кронекера (1 для $p = \ominus$ і 0 для $p = \oplus$). У результати для $p = \{\oplus; \ominus\}$ входять також j_m^p з парними m :

$$j_2^{pQ}(g) \equiv \frac{1}{2}\sqrt{1 + p\bar{v}^2} + p\frac{1}{2}\bar{v}^2 \ln \frac{1 + \sqrt{1 + p\bar{v}^2}}{\bar{v}}, \quad (40)$$

$$j_4^{pQ}(g) \equiv \frac{1}{4}(1 + p\bar{v}^2)^{3/2} - p\frac{1}{4}\bar{v}^2 j_2^{pQ}(g), \quad (41)$$

³Завершене зіткнення (або розсіяння) — це коли початкова відстань при зльоті двох частинок і кінцева відстань при їхньому розльоті набагато більша за характерний радіус взаємодії. Математично — частинки злітають з нескінченності і розлітаються на нескінченність. Завершені зіткнення — основні (і єдині) події в кінетичних теоріях Больцмана і Енскога. На противагу їм, кінетична теорія для БС потенціала моделює *незавершені* розсіяння частинок з реалістичною плавною взаємодією за допомогою процесів $\{\oplus; \ominus; \otimes\}$ на сходинках.

$$j_6^{pQ}(g) \equiv (1 + p\bar{v}^2)^{3/2} \left[\frac{1}{6} - p\frac{1}{8}\bar{v}^2 \right] + \frac{1}{8}\bar{v}^4 j_2^{pQ}(g). \quad (42)$$

В.1. Звичайні транспортні перерізи

Із законів (5) для процесів $\{\odot; \otimes\}$, у яких *не змінюється* модуль g відносної швидкості, а лише її напрямок, знаходимо для кута розсіювання $[1, 2]$:

$$\cos \chi_{ij}^{qlp} \Big|_{\{\odot; \otimes\}} = 1 - 2t_\sigma^2,$$

де $t_\sigma \equiv \hat{g} \cdot \hat{\sigma}$ — косинус кута між векторами \mathbf{g} і $\hat{\sigma}$. Оскільки $g^{qlp} \Big|_{\{\odot; \otimes\}} = g$, то для різниць із $s = \{1; 2\}$ у прямокутних дужках ф. (20) отримуємо:

$$1 - \left(\frac{g^{qlp}}{g} \cos \chi_{ij}^{qlp} \right) \Big|_{\{\odot; \otimes\}} = 2t_\sigma^2, \quad 1 - \left(\frac{g^{qlp}}{g} \cos \chi_{ij}^{qlp} \right)^2 \Big|_{\{\odot; \otimes\}} = 4t_\sigma^2 - 4t_\sigma^4.$$

Підставляючи праві частини у ф. (20) й інтегруючи [13], одержимо:

$$Q_{ij}^{(s)qlp}(g) \Big|_{\{\odot; \otimes\}} = 2\pi(\sigma_{ij}^{ql})^2 \theta^p(g) \left\{ \begin{array}{l} 2j_4^p(g) \\ 4j_6^p(g) - 4j_6^p(g) \end{array} \Big|_{s=1}^2 \right\}. \quad (43)$$

Для процесу \otimes функцію θ^\otimes слід вилучити з цієї формули тому, що необхідні функції θ^p вже входять в означення j_n^\otimes , див. ф. (39).

Відшукаймо тепер конструкції з $\cos \chi_{ij}^{qlp}$, що у ф. (20), для процесів $\{\oplus; \ominus\}$. Із законів (6) для них отримуємо:

$$\frac{\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^{qlp}}{g^2} \Big|_{\{\oplus; \ominus\}} = \frac{g^{qlp}}{g} \cos \chi_{ij}^{qlp} \Big|_{\{\oplus; \ominus\}} = 1 - (t_\sigma^2 - t_\sigma Q_{t_\sigma}),$$

де $Q_{t_\sigma} \equiv \sqrt{t_\sigma^2 + p\bar{v}^2}$. Тоді для характерних різниць маємо:

$$\begin{aligned} 1 - \left(\frac{g^{qlp}}{g} \cos \chi_{ij}^{qlp} \right) \Big|_{\{\oplus; \ominus\}} &= t_\sigma^2 - t_\sigma Q_{t_\sigma}, \\ 1 - \left(\frac{g^{qlp}}{g} \cos \chi_{ij}^{qlp} \right)^2 \Big|_{\{\oplus; \ominus\}} &= -2t_\sigma^4 + (2 - p\bar{v}^2)t_\sigma^2 + (2t_\sigma^3 - 2t_\sigma)Q_{t_\sigma}. \end{aligned}$$

Праві частини підставляємо у ф. (20) й інтегруємо [13]:

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{(s)qlp}(g) \Big|_{\{\oplus; \ominus\}} &= 2\pi(\sigma_{ij}^{ql})^2 \theta^p(g) \times \\ &\times \left\{ \begin{array}{l} j_4^p(g) - j_4^{pQ}(g) \\ (2 - p\bar{v}^2)j_4^p(g) - 2j_6^p(g) - 2j_4^{pQ}(g) + 2j_6^{pQ}(g) \end{array} \Big|_{s=1}^2 \right\}, \end{aligned} \quad (44)$$

де функції j_n^p та j_m^{pQ} задано вище, фф. (39) і (40)–(42).

Кінцеві вирази (43) і (44) для потрібних нам транспортних перерізів розсіяння можна записати явніше:

$$Q_{ij}^{(s)c1\odot}(g) \Big|_{s=[\frac{1}{2}]} = \pi(\sigma_{ij}^{c1})^2 \theta^\odot(g) \left[\frac{1}{\frac{2}{3}} \right], \quad (45)$$

$$Q_{ij}^{(s)ql\otimes}(g) \Big|_{s=[\frac{1}{2}]} = \pi(\sigma_{ij}^{ql})^2 \left[\frac{\theta^\otimes(g) + \theta^\ominus(g) \bar{v}^4}{\frac{2}{3}\theta^\otimes(g) + \theta^\ominus(g)(2\bar{v}^4 - \frac{4}{3}\bar{v}^6)} \right]; \quad (46)$$

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{(1)qlp}(g) \Big|_{p=\{\oplus, \ominus\}} &= \pi(\sigma_{ij}^{ql})^2 \theta^p(g) \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\delta_{\ominus, p}\bar{v}^4 - \frac{1}{2}(1 + p\bar{v}^2)^{3/2} + \right. \\ &\left. + p\frac{1}{2}\bar{v}^2 j_2^{pQ}(g) \right], \end{aligned} \quad (47)$$

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{(2)qlp}(g) \Big|_{p=\{\oplus, \ominus\}} &= \pi(\sigma_{ij}^{ql})^2 \theta^p(g) \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2}\bar{v}^2 + \delta_{\ominus, p}(-\bar{v}^4 + \frac{7}{6}\bar{v}^6) - \right. \\ &\left. - (1 + p\bar{v}^2)^{3/2} \left(\frac{1}{3} + p\frac{1}{2}\bar{v}^2 \right) + (p\bar{v}^2 + \frac{1}{2}\bar{v}^4) j_2^{pQ}(g) \right], \end{aligned} \quad (48)$$

де $\bar{v} \equiv \sqrt{\epsilon_{ij}^{ql}}/g$. Явний вигляд функції j_2^{pQ} у двох останніх виразах наведено у ф. (40).

В.2. Вироджені транспортні перерізи розсіяння

Наведімо деталі розрахунку величин $\bar{Q}_{ij}^{(s)qlp}$, ф. (22), для $s = \{2; 4\}$. Із законів (6) для процесів $\{\oplus; \ominus\}$ переконуємося, що різниці у прямокутних дужках ф. (22) *не залежать* від $\hat{\sigma}$:

$$1 - \left(\frac{g^{qlp}}{g} \right)^2 \Big|_{\{\oplus; \ominus\}} = -p\bar{v}^2, \quad 1 - \left(\frac{g^{qlp}}{g} \right)^4 \Big|_{\{\oplus; \ominus\}} = -p2\bar{v}^2 - \bar{v}^4,$$

де $\bar{v} \equiv \sqrt{\epsilon}/g$. Тому інтегрування за $\hat{\sigma}$ особливо просте і дає [13]:

$$\int d\hat{\sigma} \theta^p(\hat{g} \cdot \hat{\sigma}) (\hat{g} \cdot \hat{\sigma}) \Big|_{\{\oplus; \ominus\}} = \pi \theta^p(g) 2j_2^p(g),$$

де $j_2^p(g) \Big|_{\{\oplus; \ominus\}} \equiv \frac{1}{2}[1 - \delta_{\ominus, p}\bar{v}^2]$, ф. (39). Маючи це, легко записати кінцеві результати для вироджених транспортних перерізів:

$$\bar{Q}_{ij}^{(s)qlp}(g) \Big|_{s=[\frac{2}{4}]} = \pi(\sigma_{ij}^{ql})^2 \theta^p(g) \left[\begin{array}{l} -p\bar{v}^2 - \delta_{\ominus, p}\bar{v}^4 \\ -p2\bar{v}^2 - (1 + 2\delta_{\ominus, p})\bar{v}^4 + \delta_{\ominus, p}\bar{v}^6 \end{array} \right]. \quad (49)$$

Вирази (46)–(49) виявляють для процесів \otimes , \oplus та \ominus непроту залежність транспортних перерізів від швидкості g (як через степені \bar{v} , так і через θ^\otimes і θ^\ominus), котра насправді *відсутня* для процесу \odot ,

ф. (45). Те саме можна сказати про їхню температурну залежність (через $\bar{\epsilon}_{ij}^{ql} \equiv \epsilon_{ij}^{ql}/[k_B T^{k_0}]$), що своєю чергою, призводить до складної залежності коефіцієнтів переносу від температури.

Підсумовуючи отримані результати (45)–(48) і (49) для транспортних перерізів, варто наголосити, що залежність від відносної швидкості g частинок реалізується здебільша через $\bar{v} \equiv \sqrt{\bar{\epsilon}}/g$, а для процесів \otimes і \ominus — додатково через обмеження завдяки функціям $\theta^{\otimes}(g)$ і $\theta^{\ominus}(g)$.

С. Парціальні омега-інтеграли

С.1. Звичайні омега-інтеграли

Підставмо одержані вирази для транспортних перерізів розсіяння (43) і (44) у ф. (23) для парціальних омега-інтегралів. Відповідні внески для необмінних $\{\odot; \otimes\}$ та обмінних $\{\oplus; \ominus\}$ процесів можна виразити через характерні інтеграли $\mathcal{J}_{g,k}^p[\varphi]$, див. ф. (61):

$$\Omega_{ij}^{(s,r)qlp} \Big|_{\{\odot; \otimes\}} = \omega_{ij}^{ql} \left\{ \begin{array}{l} 4\mathcal{J}_{g,2r+3}^p[j_4^p] \\ 8\mathcal{J}_{g,2r+3}^p[j_4^p - j_6^p] \end{array} \Big| \begin{array}{l} s=1 \\ s=2 \end{array} \right\}, \quad (50)$$

$$\Omega_{ij}^{(s,r)qlp} \Big|_{\{\oplus; \ominus\}} = \omega_{ij}^{ql} \left\{ \begin{array}{l} 2\mathcal{J}_{g,2r+3}^p[j_4^p] - 2\mathcal{J}_{g,2r+3}^p[j_4^{pQ}] \\ 4\mathcal{J}_{g,2r+3}^p[j_4^p - j_6^p] - 2p\bar{\epsilon}\mathcal{J}_{g,2r+1}^p[j_4^p] - \\ - 4\mathcal{J}_{g,2r+3}^p[j_4^{pQ} - j_6^{pQ}] \end{array} \Big| \begin{array}{l} s=1 \\ s=2 \end{array} \right\}, \quad (51)$$

де амплітуда

$$\omega_{ij}^{ql} \equiv \left(\frac{k_B T^{k_0}}{2\pi\mu_{ij}} \right)^{1/2} \pi(\sigma_{ij}^{ql})^2.$$

Як видно із загальних виразів для інтегральних дужок, поданих на с. 19, нам потрібні парціальні омега-інтеграли з індексами (1,1), (1,2), (1,3) та (2,2). Для $s=1$ потрібно такі інтеграли:

$$\mathcal{J}_{g,k}^p[j_4^p] \Big|_{k=5;7;9} \quad \text{та} \quad \mathcal{J}_{g,k}^p[j_4^{pQ}] \Big|_{k=5;7;9}.$$

Для випадку (2,2) додатково потрібно ще $\mathcal{J}_{g,7}^p[j_6^p]$ та $\mathcal{J}_{g,7}^p[j_6^{pQ}]$. Усі ці інтеграли розраховано і подано у §D.2.

За допомогою фф. (50) і (51) одержано такі результати:

$$\Omega_{ij}^{(1,1)ql} \left[\begin{array}{c} \odot \\ \otimes \\ \oplus \\ \ominus \end{array} \right] = \omega_{ij}^{ql} \left[\begin{array}{c} 1 \\ 1 - e^{-\bar{\epsilon}}(1 + \bar{\epsilon}) \\ \frac{1}{2} \{ 1 - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) \} \\ \frac{1}{2} \{ e^{-\bar{\epsilon}}(1 + \bar{\epsilon}) - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{-\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) \} \end{array} \right],$$

$$\Omega_{ij}^{(1,2)ql} \left[\begin{array}{c} \odot \\ \otimes \\ \oplus \\ \ominus \end{array} \right] = \omega_{ij}^{ql} \left[\begin{array}{c} 3 \\ 3 \{ 1 - e^{-\bar{\epsilon}}(1 + \bar{\epsilon} + \frac{1}{3}\bar{\epsilon}^2) \} \\ \frac{1}{2} \{ 3 - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} [(3 - \frac{1}{2}\bar{\epsilon})K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}K_0(\frac{1}{2}\bar{\epsilon})] \} \\ \frac{1}{2} \{ 3e^{-\bar{\epsilon}}(1 + \bar{\epsilon} + \frac{1}{3}\bar{\epsilon}^2) - \\ - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{-\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} [(3 + \frac{1}{2}\bar{\epsilon})K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}K_0(\frac{1}{2}\bar{\epsilon})] \} \end{array} \right],$$

$$\Omega_{ij}^{(1,3)ql} \left[\begin{array}{c} \odot \\ \otimes \\ \oplus \\ \ominus \end{array} \right] = \omega_{ij}^{ql} \left[\begin{array}{c} 12 \\ 12 \{ 1 - e^{-\bar{\epsilon}}(1 + \bar{\epsilon} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2 + \frac{1}{12}\bar{\epsilon}^3) \} \\ \frac{1}{2} \{ 12 - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} [(12 - 3\bar{\epsilon} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2)K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) + \\ + (\frac{5}{2}\bar{\epsilon} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2)K_0(\frac{1}{2}\bar{\epsilon})] \} \\ \frac{1}{2} \{ 12e^{-\bar{\epsilon}}(1 + \bar{\epsilon} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2 + \frac{1}{12}\bar{\epsilon}^3) - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{-\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} \times \\ \times [(12 + 3\bar{\epsilon} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2)K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) + (\frac{5}{2}\bar{\epsilon} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2)K_0(\frac{1}{2}\bar{\epsilon})] \} \end{array} \right],$$

$$\Omega_{ij}^{(2,2)ql} \left[\begin{array}{c} \odot \\ \otimes \\ \oplus \\ \ominus \end{array} \right] = \omega_{ij}^{ql} \left[\begin{array}{c} 2 \\ 2 \{ 1 - e^{-\bar{\epsilon}}(1 + \bar{\epsilon}) \} \\ 1 - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) \\ e^{-\bar{\epsilon}}(1 + \frac{3}{2}\bar{\epsilon} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2) - \frac{1}{2}\bar{\epsilon} e^{-\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) \end{array} \right],$$

де слід покласти $\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}_{ij}^{ql}$.

Бачимо, що для процесу \odot отримано відомі результати для твердих кульок [1, 2, 14]. Для \otimes вже присутня залежність від висоти сходинки, яка описується комбінацією експоненти і відповідного многочлена; однак в границі *нескінченно високої сходинки* внесок з експонентою зникає і одержуємо результат для непроникної стінки, що за формою такий же, як для \odot на твердій серцевині. Результати для процесів \oplus та \ominus виражаються через модифіковані функції Бесселя другого роду $K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon})$ і $K_0(\frac{1}{2}\bar{\epsilon})$, ф. (59). Варто зауважити, що в них загальний числовий коефіцієнт у прямокутних дужках вдвічі менший.⁴ Отримані результати опосередковано через $\bar{\epsilon}$ містять додаткову залежність парціальних омега-інтегралів від температури (основна — коренева — походить від ω_{ij}^{ql}).

С.2. Вироджені омега-інтеграли

Як і в §С.1, підставляючи ф. (49) для вироджених транспортних перерізів $\bar{Q}_{ij}^{(s)qlp}$ в означення (23), отримуємо загальні результати для

⁴Це походить від *збереження* нормальної складової відносної швидкості; у процесах $\{\odot; \otimes\}$ має місце *інверсія*.

парціальних вироджених омега-інтегралів:

$$\bar{\Omega}_{ij}^{(s,r)qlp} \Big|_{\{\oplus;\ominus\}} = \omega_{ij}^{ql} \left\{ \begin{array}{l} -p\bar{\epsilon} \mathcal{J}_{g,2r+1}^p - \delta_{\ominus,p} \bar{\epsilon}^2 \mathcal{J}_{g,2r-1}^p \\ -p2\bar{\epsilon} \mathcal{J}_{g,2r+1}^p - (1 + 2\delta_{\ominus,p}) \bar{\epsilon}^2 \mathcal{J}_{g,2r-1}^p \\ + \delta_{\ominus,p} \bar{\epsilon}^3 \mathcal{J}_{g,2r-3}^p \end{array} \right|_{\begin{array}{l} s=2 \\ s=4 \end{array}}, \quad (52)$$

де для $s = 2$ індекс $r \geq 1$, а для $s = 4$ індекс $r \geq 2$. Інтеграли $\mathcal{J}_{g,k}^p \equiv \mathcal{J}_{g,k}^p[\varphi = 1]$ зводяться до гамма-функцій, фф. (55) і (56), і ми одержуємо:

$$\bar{\Omega}_{ij}^{(2,r)qlp} = \omega_{ij}^{ql} \left\{ \begin{array}{l} \oplus : -\frac{1}{2}\bar{\epsilon}\Gamma(r+1), \\ \ominus : \frac{1}{2}\bar{\epsilon}\tilde{\Gamma}_2(r+1;\bar{\epsilon}) - \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2\tilde{\Gamma}_2(r;\bar{\epsilon}); \end{array} \right. \quad (53)$$

$$\bar{\Omega}_{ij}^{(4,r)qlp} = \omega_{ij}^{ql} \left\{ \begin{array}{l} \oplus : -\bar{\epsilon}\Gamma(r+1) - \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2\Gamma(r), \\ \ominus : \bar{\epsilon}\tilde{\Gamma}_2(r+1;\bar{\epsilon}) - \frac{3}{2}\bar{\epsilon}^2\tilde{\Gamma}_2(r;\bar{\epsilon}) + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^3\tilde{\Gamma}_2(r-1;\bar{\epsilon}). \end{array} \right. \quad (54)$$

Для кількох перших значень r слідує такі кінцеві вирази:

$$\begin{aligned} \bar{\Omega}_{ij}^{(2,1)qt} \Big|_{\oplus} &= \omega_{ij}^{ql} \left[e^{-\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} \frac{1}{2}\bar{\epsilon} \right], \\ \bar{\Omega}_{ij}^{(2,2)qt} \Big|_{\oplus} &= \omega_{ij}^{ql} \left[e^{-\bar{\epsilon}} \left(\bar{\epsilon} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2 \right) \right], \\ \bar{\Omega}_{ij}^{(2,3)qt} \Big|_{\oplus} &= \omega_{ij}^{ql} \left[e^{-\bar{\epsilon}} \left(3\bar{\epsilon} + 2\bar{\epsilon}^2 + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^3 \right) \right]; \\ \bar{\Omega}_{ij}^{(4,2)qt} \Big|_{\oplus} &= \omega_{ij}^{ql} \left[e^{-\bar{\epsilon}} \left(2\bar{\epsilon} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2 \right) \right], \\ \bar{\Omega}_{ij}^{(4,3)qt} \Big|_{\oplus} &= \omega_{ij}^{ql} \left[e^{-\bar{\epsilon}} \left(6\bar{\epsilon} + 3\bar{\epsilon}^2 + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^3 \right) \right], \\ \bar{\Omega}_{ij}^{(4,4)qt} \Big|_{\oplus} &= \omega_{ij}^{ql} \left[e^{-\bar{\epsilon}} \left(24\bar{\epsilon} + 15\bar{\epsilon}^2 + 4\bar{\epsilon}^3 + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^4 \right) \right]. \end{aligned}$$

Отже, стосовно залежності від висоти сходинки $\bar{\epsilon}$, вироджені парціальні омега-інтеграли є многочленами (для процесу \oplus) або комбінаціями експоненти і многочленів (для процесу \ominus).

D. Деякі спецфункції та характерні інтеграли

D.1. Спеціальні функції

Тут повторено потрібні нам відомості, наведені в роботі [13].

Інтегральні означення **повної і неповних гамма-функцій** [17]:

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^\infty dt e^{-t} t^{z-1}, \quad (55)$$

$$\Gamma_2(z; x) \equiv \int_0^x dt e^{-t} t^{z-1}, \quad \tilde{\Gamma}_2(z; x) \equiv \int_x^\infty dt e^{-t} t^{z-1}. \quad (56)$$

$\tilde{\Gamma}_2$ будемо називати *доповненням* неповної гамма-функції Γ_2 , бо

$$\Gamma_2(z; x) + \tilde{\Gamma}_2(z; x) = \Gamma(z).$$

Інтегруючи у фф. (56) за частинами, маємо рекурентні формули:

$$\Gamma_2(z+1; x) = z\Gamma_2(z; x) - e^{-x}x^z, \quad \tilde{\Gamma}_2(z+1; x) = z\tilde{\Gamma}_2(z; x) + e^{-x}x^z.$$

За їх допомогою, знайшовши попередньо інтеграли (56) для $z = 1$, одержуємо для наступних цілих z такі результати:

$$\Gamma_2(z; x) = \Gamma(z) - e^{-x}\gamma_2(z; x), \quad \tilde{\Gamma}_2(z; x) = e^{-x}\gamma_2(z; x), \quad (57)$$

де многочлени $\gamma_2(z; x)$ мають вигляд:

$$\begin{aligned} \gamma_2(1; x) &\equiv 1, \\ \gamma_2(2; x) &\equiv 1 + x, \\ \gamma_2(3; x) &\equiv 2 + 2x + x^2, \\ \gamma_2(4; x) &\equiv 6 + 6x + 3x^2 + x^3, \\ \gamma_2(5; x) &\equiv 24 + 24x + 12x^2 + 4x^3 + x^4. \end{aligned} \quad (58)$$

Модифіковані функції Бесселя другого роду $K_\nu(z)$ мають таке інтегральне представлення [17]:

$$K_\nu(z) = \int_0^\infty dx e^{-z \cosh x} \cosh(\nu x). \quad (59)$$

Вони не є незалежними тому, що будь-які функції з трьома послідовними індексами зв'язані між собою співвідношенням [17]:

$$K_{\nu+1}(z) - K_{\nu-1}(z) = 2\nu z^{-1} K_\nu(z). \quad (60)$$

За його допомогою всі K_ν можна виразити через будь-які дві "сусідні" функції, напр., K_0 і K_1 .

D.2. Характерні інтеграли

Тут наведено результати для інтегралів, через які виражаються потрібні нам парціальні омега-інтеграли.

Подібно до праці [13], введемо позначення для інтегрування за безрозмірною швидкістю g :

$$\mathcal{J}_{g,k}^p[\varphi] \equiv \int_0^\infty dg \theta^p(g) e^{-g^2} g^k \varphi(g), \quad (61)$$

де крім g^k , характерного для гамма-функцій (55) і (56), ще стоїть множник $\varphi(g)$, який вказуємо як функціональний аргумент.

Далі наведено загальні формули і конкретні результати для функцій $j_n^p(g)$ та $j_n^{pQ}(g)$, фф. (39)–(42), що відповідають процесам $\{\ominus; \otimes\}$ і $\{\oplus; \ominus\}$.

Інтеграли $\mathcal{J}_{g,k}^p[j_n^p]$. Для функцій $j_n^p(g)$ одержано [13]:

$$\mathcal{J}_{g,k}^p[j_n^p] = \frac{1}{2n} \left\{ \begin{array}{l} \Gamma(\frac{k+1}{2}) \\ \tilde{\Gamma}_2(\frac{k+1}{2}; \bar{\epsilon}) - \bar{\epsilon}^{n/2} \tilde{\Gamma}_2(\frac{k+1-n}{2}; \bar{\epsilon}) \\ \Gamma_2(\frac{k+1}{2}; \bar{\epsilon}) + \bar{\epsilon}^{n/2} \tilde{\Gamma}_2(\frac{k+1-n}{2}; \bar{\epsilon}) \end{array} \left| \begin{array}{l} \oplus, \oplus \\ \ominus \\ \otimes \end{array} \right. \right\}, \quad (62)$$

де значення $\bar{\epsilon}$ другого аргумента функцій походить від меж інтегрування, виражених за допомогою $\theta^p(g)$. Ці формули годяться для будь-яких цілих $k \geq n$.

Щоб мати кінцеві вирази для парціальних омега-інтегралів, нам потрібні результати для непарних k і парних n . За допомогою фф. (62), (57) та (58) знаходимо для $j_4^p(g)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{g,5}^p[j_4^p] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: 1, \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}}(1 + \bar{\epsilon}), \quad \otimes: [1 - e^{-\bar{\epsilon}}(1 + \bar{\epsilon})] \}, \\ \mathcal{J}_{g,7}^p[j_4^p] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: 3, \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}}(3 + 3\bar{\epsilon} + \bar{\epsilon}^2), \\ &\quad \otimes: [3 - e^{-\bar{\epsilon}}(3 + 3\bar{\epsilon} + \bar{\epsilon}^2)] \}, \\ \mathcal{J}_{g,9}^p[j_4^p] &= \frac{1}{4} \{ \oplus: 12, \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}}(12 + 12\bar{\epsilon} + 6\bar{\epsilon}^2 + \bar{\epsilon}^3), \\ &\quad \otimes: [12 - e^{-\bar{\epsilon}}(12 + 12\bar{\epsilon} + 6\bar{\epsilon}^2 + \bar{\epsilon}^3)] \}, \end{aligned}$$

де для кожного процесу коефіцієнт $\frac{1}{4}$ треба домножувати на функцію, вказану у фігурних дужках після символу цього процесу. Результати для \ominus такі самі, як для \oplus .

Цілком подібно отримуємо для $j_6^p(g)$:

$$\mathcal{J}_{g,7}^p[j_6^p] = \frac{1}{4} \{ \oplus: 2, \quad \ominus: e^{-\bar{\epsilon}}(2 + 2\bar{\epsilon} + \bar{\epsilon}^2), \quad \otimes: [2 - e^{-\bar{\epsilon}}(2 + 2\bar{\epsilon} + \bar{\epsilon}^2)] \}.$$

Інтеграли $\mathcal{J}_{g,k}^p[j_m^{pQ}]$ із непарним k і парним m ($k > m$). Спочатку ми наводимо кінцеві вирази, а потім показуємо, як потрібні нам інтеграли звести до модифікованих функцій Бесселя. Отже:

$$\mathcal{J}_{g, \left[\begin{smallmatrix} 5 \\ 7 \\ 9 \end{smallmatrix} \right]}^p[j_4^{pQ}] = \frac{1}{8} \bar{\epsilon} e^{p\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} \left[\begin{array}{l} K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) \\ (3 - p\frac{1}{2}\bar{\epsilon})K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}K_0(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) \\ (12 - p3\bar{\epsilon} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2)K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) + (\frac{5}{2}\bar{\epsilon} - p\frac{1}{2}\bar{\epsilon}^2)K_0(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) \end{array} \right], \quad (63)$$

$$\mathcal{J}_{g,7}^p[j_6^{pQ}] = \frac{1}{8} \bar{\epsilon} e^{p\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} \left[(2 - p\frac{1}{2}\bar{\epsilon})K_1(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}K_0(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}) \right]. \quad (64)$$

Зведення інтегралів до функцій Бесселя подано в препринті [13]. Однак тут ми наводимо кращий і загальніший його варіант. У явному вигляді функції j_m^{pQ} для парного m являють собою [13] многочлени від \bar{v}^2 , що множаться на $(1 + p\bar{v}^2)^{3/2}$ плюс доданок із j_2^{pQ} , заданою ф. (40). Однак, шукаючи $\mathcal{J}_{g,k}^p[j_m^{pQ}]$, зручніше виходити з інтегрального означення цих функцій [13]:

$$j_m^{pQ}(g) \equiv \int_{t_p}^1 dt t^{m-2} \sqrt{t^2 + p\bar{v}^2}, \quad t_{\{\oplus; \ominus\}} = \{0; \bar{v}\}, \quad (65)$$

де $\bar{v} \equiv \sqrt{\bar{\epsilon}}/g$.

Ввівши тут заміни $(t = \bar{v} \sinh x)|_{\oplus}$ або $(t = \bar{v} \cosh x)|_{\ominus}$, отримаємо:

$$\mathcal{J}_{g,k}^p[j_m^{pQ}] = \int_0^\infty dg \theta^p(g) e^{-g^2} g^k \bar{v}^m \int_0^{x_p} dx \left\{ \begin{array}{l} \cosh^2 x \sinh^{m-2} x \\ \sinh^2 x \cosh^{m-2} x \end{array} \left| \begin{array}{l} \oplus \\ \ominus \end{array} \right. \right\}$$

з верніми межами $x_{\{\oplus; \ominus\}} = \{ \operatorname{arcsch}(g/\sqrt{\bar{\epsilon}}); \operatorname{arcch}(g/\sqrt{\bar{\epsilon}}) \}$. Змінивши порядок інтегрування, одержимо:

$$\mathcal{J}_{g,k}^p[j_m^{pQ}] = \frac{1}{2} \bar{\epsilon}^{m/2} \int_0^\infty dx \left\{ \begin{array}{l} \cosh^2 x \sinh^{m-2} x \\ \sinh^2 x \cosh^{m-2} x \end{array} \left| \begin{array}{l} \oplus \\ \ominus \end{array} \right. \right\} \int_{g_p}^{+\infty} dg e^{-g^2} g^{k-m}$$

із нижніми межами $g_{\{\oplus; \ominus\}} = \{ \sqrt{\bar{\epsilon}} \sinh x; \sqrt{\bar{\epsilon}} \cosh x \}$ для внутрішнього інтеграла. Він являє собою функцію $\tilde{\Gamma}_2(\frac{k-m+1}{2}; g_p^2)$, ф. (56), перший аргумент якої — ціле число.

Перейдімо у зовнішньому інтегралі до змінної $t = 2x$, врахувавши, що підінтегральні функції дорівнюють:

$$\left\{ \begin{array}{l} \cosh^2 x \\ \sinh^2 x \end{array} \left| \begin{array}{l} \oplus \\ \ominus \end{array} \right. \right\} = \frac{1}{2} (\cosh t + p), \quad \left\{ \begin{array}{l} \sinh x \\ \cosh x \end{array} \left| \begin{array}{l} \oplus \\ \ominus \end{array} \right. \right\}^{m-2} = \frac{1}{2^{\frac{m-2}{2}}} [\cosh t - p]^{\frac{m-2}{2}}.$$

Крім того, в термінах нової змінної t можемо записати:

$$\tilde{\Gamma}_2(\frac{k-m+1}{2}; g_p^2) = e^{pz - z \cosh t} \gamma_2(\frac{k-m+1}{2}; y_p),$$

де $z \equiv \frac{1}{2}\bar{\epsilon}$, γ_2 — відповідний многочлен з ф. (58), а $y_p \equiv z[\cosh t - p]$. Тоді остаточно отримуємо:

$$\mathcal{J}_{g,k}^p[j_m^{pQ}] = \frac{1}{2^{\frac{m}{2}+2}} \bar{\epsilon}^{\frac{m}{2}} e^{p\frac{1}{2}\bar{\epsilon}} \int_0^\infty dt e^{-z \cosh t} (\cosh t + p) [\cosh t - p]^{\frac{m-2}{2}} \gamma_2(\frac{k-m+1}{2}; y_p).$$

Для конкретних значень k та m сюди треба підставити вираз для відповідного многочлена γ_2 , ф. (58), провести перемноження і виразити степені $\cosh^l t$ через $\cosh(\nu t)$. У результаті одержимо лінійні

комбінації функцій $K_\nu(\frac{1}{2}\bar{\epsilon})$, ф. (59), котрі можна виразити через K_1 та K_0 завдяки властивості (60). Для потрібних нам значень індексів k та m отримуємо результати (63) та (64).

Література

1. С. Чепмен, Т. Каулінг. *Математическая теория неоднородных газов*. Изд. иностр. лит., Москва, 1960.
2. Дж. Ферцигер, Г. Капер. *Математическая теория процессов переноса в газах*. Мир, Москва, 1976.
3. Н. Т. Davis, S. A. Rice, J. V. Sengers. On the kinetic theory of dense fluids. IX. The fluid of rigid spheres with a square-well attraction. *J. Chem. Phys.*, **35**(6):2210–2233, 1961.
4. J. Karkheck, H. van Beijeren, I. de Schepper, G. Stell. Kinetic theory and H theorem for a dense square-well fluid. *Phys. Rev. A*, **32**(4):2517–2520, 1985.
5. H. van Beijeren, J. Karkheck, J. V. Sengers. Nonequilibrium temperature and bulk viscosity for a dense fluid of square-well molecules. *Phys. Rev. A*, **37**(6):2247–2250, 1988.
6. М. В. Токарчук, І. П. Омелян. Модельні кінетичні рівняння для густих газів і рідин. *Укр. фіз. журн.*, **35**(8):1255–1261, 1990.
7. І. Р. Омелян, М. В. Токарчук. Kinetic equation for liquids with a multistep potential of interaction. H -theorem. *Physica A*, **234**(1-2):89–107, 1996.
8. М. В. Токарчук, І. Р. Омелян, А. Е. Кобрын. Kinetic equation for liquids with a multistep potential of interaction: Calculation of transport coefficients. *Phys. Rev. E*, **62**(6):8021–8036, 2000.
9. I. L. McLaughlin, H. T. Davis. Kinetic theory of dense fluid mixtures. I. Square-well model. *J. Chem. Phys.*, **45**(6):2020–2031, 1966.
10. J. Palyvos, K. D. Luks, I. L. McLaughlin, H. T. Davis. Kinetic theory of dense-fluid mixtures. IV. Square-well model computations. *J. Chem. Phys.*, **47**(6):2082–2089, 1967.
11. J. Karkheck, G. Stell, J. Xu. Transport theory for the Lennard-Jones dense fluid. *J. Chem. Phys.*, **89**(9):5829–5833, 1988.
12. М. В. Токарчук, І. П. Омелян. *К кинетической теории процессов переноса в плотных газах*. ИТФ, К., 1987. (Препр. / АН УССР, Ин-т теор. физики; ИТФ-87-152Р).
13. Й. А. Гуменюк, М. В. Токарчук. *Кінетична теорія густих газових сумішей з багатосходинковим потенціалом взаємодії: нормальний розв'язок і коефіцієнти переносу*. ІФКС, Львів, 2011.

(Препринт / НАН України, Ін-т фізики конденс. систем; ICMP-11-06U).

14. В. П. Силин. *Введение в кинетическую теорию газов*. Наука, Москва, 1971.
15. М. В. Токарчук, Й. А. Гуменюк. *Виведення рівнянь гідродинаміки для густих сумішей газів зі сходянковою взаємодією між частинками*. ІФКС, Львів, 2004. (Препринт / НАН України, Ін-т фізики конденс. систем; ICMP-04-09U).
16. M. V. Tokarchuk, Y. A. Humenyuk. Hydrodynamic equations for dense fluid mixtures with multistep interaction between particles. *Condens. Matter Phys.*, **10**(2(50)):151–163, 2007.
17. Г. А. Корн, Т. М. Корн. *Справочник по математике для научных работников и инженеров*. Наука, Москва, 1973.
18. M. López de Haro, E. G. D. Cohen, J. M. Kincaid. The Enskog theory for multicomponent mixtures. I. Linear transport theory. *J. Chem. Phys.*, **78**(5):2746–2757, 1983.

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. **Condensed Matter Physics** is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN: Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences; ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services; INSPEC; "Referatyvnyj Zhurnal"; "Dzherelo".

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii.

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlachy, *Ljubljana*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2761978; Fax: +38(032)2761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>