

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-96-21U

О.Є.Кобрин, І.П.Омелян, М.В.Токарчук

НОРМАЛЬНИЙ РОЗВ'ЯЗОК КІНЕТИЧНОГО РІВНЯННЯ
ЕНСКОГА-ЛАНДАУ ДЛЯ ДВОКОМПОНЕНТНОЇ СИСТЕМИ
ЗАРЯДЖЕНИХ ТВЕРДИХ СФЕР МЕТОДОМ
ЧЕПМЕНА-ЕНСКОГА. ЧИСЕЛЬНИЙ РОЗРАХУНОК
КОЕФІЦІЄНТІВ ПЕРЕНОСУ ДЛЯ СУМІШЕЙ Ar-Kr, Ar-Xe,
Kr-Xe

УДК: 533, 536.75, 537.75, 536-12.11

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

Нормальний розв'язок кінетичного рівняння Енскога-Ландау для двокомпонентної системи заряджених твердих сфер методом Чепмена-Енскога. Чисельний розрахунок коефіцієнтів переносу для сумішей Ar-Kr, Ar-Xe, Kr-Xe

О.Є.Кобрин, І.П.Омелян, М.В.Токарчук

Анотація. Пропонується кінетичне рівняння Енскога-Ландау для багатокомпонентної системи заряджених твердих сфер, що отримане методом нерівноважного статистичного оператора з рівняння Ліувіля із модифікованою граничною умовою. На основі цього рівняння для бінарної суміші методом Чепмена-Енскога у першому наближенні знайдено нормальний розв'язок і коефіцієнти переносу: об'ємну κ та зсувну η в'язкості, теплопровідність λ , коефіцієнти взаємної дифузії $D^{\alpha\beta}$ та термодифузії D_T^α . Проведено чисельні розрахунки κ , η , $D^{\alpha\beta}$, D_T^α для бінарних сумішей Ar-Kr, Ar-Xe, Kr-Xe з різними співвідношеннями концентрацій у випадках відсутності та наявності далекосяжної (кулонівської) взаємодії. Результати порівняно з даними інших теорій і експерименту.

The normal solution to the Enskog-Landau kinetic equation for two-component system of charged hard spheres using the Chapman-Enskog method. Numerical calculation of transport coefficients for mixtures Ar-Kr, Ar-Xe, Kr-Xe

A.E.Kobryn, I.P.Omelyan, M.V.Tokarchuk

Abstract. Enskog-Landau kinetic equation for manycomponent system of charged hard spheres, which has been obtained from the Liouville equation with modified boundary condition by the method of nonequilibrium statistical operator, is proposed. On the basis of this equation the normal solution and transport coefficients such as bulk κ and shear η viscosities, thermal conductivity λ , mutual diffusion $D^{\alpha\beta}$ and thermal diffusion D_T^α have been obtained for a binary mixture in the first approximation using Chapman-Enskog method. Numerical calculations of κ , η , $D^{\alpha\beta}$ and D_T^α for mixtures Ar-Kr, Ar-Xe, Kr-Xe with different concentrations of compounds have been evaluated for the cases of absence and presence for long-range (Coulomb) interaction. The results are compared with those ones from other theories and experiment.

Подається до Physica A
Submitted to Physica A

© Інститут фізики конденсованих систем 1996
Institute for Condensed Matter Physics 1996

1. Вступ

Кінетичне рівняння Енскога-Ландау для однокомпонентної системи заряджених твердих сфер [1] є відносно новим. Виведене з перших принципів статистичної механіки воно добре описує процеси переносу в помірно густих системах, а інтеграл зіткнень такого рівняння не має неаналітичності на малих відстанях. Чисельні розрахунки для зсувної в'язкості η та теплопровідності λ на основі нормального розв'язку цього рівняння методом Чепмена-Енскога показали добре співпадіння теорії з експериментальними даними [2]. В [3,4] для цього рівняння був знайдений нестационарний розв'язок і коефіцієнти переносу методом граничних умов [5], які у випадку стаціонарного процесу співпадали з результатами [2]. Однак, як і будь-яка однокомпонентна система, вона залишалась лише модельною [6,7].

Традиційний інтерес до багатокомпонентних систем, зокрема до бінарних сумішей густих газів, рідин та плазми, в останні роки підсилюється ще й тим, що суттєвий поступ у розвитку обчислювальної техніки дозволив відносно легко доповнювати теорію результатами математичного моделювання. Кінетичні коефіцієнти нерівноважних систем досліджувались різними методами: по теорії Бхатнагара-Гросса-Крука [8], Гріна-Кубо [9,10], методом Фроста [11], при поєднанні кінетики й рівнянь нелінійної гідродинаміки [12], в однорідному наближенні [13,14]. Здійснена математична побудова розширеної термодинаміки густих газів і рідин (зокрема сумішей із твердих сфер в рамках теорії RET [1]) [15], доведена термодинамічна сумісність кінетичних рівнянь типу Енскога для M -компонентних систем та Енског-подібних кінетичних рівнянь для реагуючих сумішей [16,17], порівняно результати макроскопічних і мікроскопічних теорій [18,19]. Одночасно з вдосконалення методів розрахунку кінетичних коефіцієнтів відбувалась також оптимізація чисельних моделювань Монте-Карло та молекулярної динаміки [20–22]. У деяких випадках чисто теоретичні моделі й задачі носили також прикладний характер: модель Гросса-Джексона [23], обернена задача теплопровідності [24], ефективні коефіцієнти переносу [25–27]. Тому природним було бажання розвинути теорію [1,2] на багатокомпонентні системи. Тим більше, що для заряджених систем послідовної теорії ще не існує. Якщо в роботах [8–27] і розраховувались кінетичні коефіцієнти (такі як в'язкість η , провідність σ , теплопровідність λ , коефіцієнти взаємної дифузії $D^{\alpha\beta}$ та термодифузії D_T^α), то скрізь відмічається, що найкраще співпадіння з експериментальними даними (а також МС та МД) є для незаряджених систем і при

відносно невисоких густинах. В [21], зокрема, відмічається, що при високих густинах співпадіння погане (теорія не працює). А в [22] на основі результатів МС підсумовується, що η краще співпадає з експериментом, ніж λ у переважній більшості випадків. Взагалі, гірша узгодженість теорії й експерименту для теплопровідності λ відома давно. Пов'язане це перш за все з тим, що із збільшенням густини системи сильно зростає роль міжчастинкових кореляцій, які треба враховувати [28]. Це, в свою чергу, приводить до змін в локальних законах збереження, що використовуються при розв'язуванні кінетичних рівнянь [3].

У даній роботі пропонується кінетичне рівняння Енскога-Ландау для багатокомпонентної системи заряджених твердих сфер, його нормальний розв'язок методом Чепмена-Енскога та коефіцієнти переносу для бінарної суміші. Вперше теоретична частина цієї роботи була запропонована авторами в [29,30] і доповнюється результатами чисельних розрахунків для більшості кінетичних коефіцієнтів й порівняння їх з експериментальними даними та МД. Окрема увага звертається на обчислення Ω -інтегралів для далекосяжного типу взаємодії (у даному випадку кулонівського), зокрема, на знаходження радіуса статичного екранування; а також на координатні функції розподілу у виразах для коефіцієнтів переносу.

2. Початкові співвідношення

Розглянемо нерівноважну систему N класичних частинок, що складається з M сортів заряджених твердих сфер. Кількість частинок кожного сорту рівна N_α , де α пробігає всі значення від 1 до M , причому $\sum_{\alpha=1}^M N_\alpha = N$. Маса частинок рівні m_α , всі разом вони займають об'єм V . Вважається, що виконується термодинамічна границя: $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, то $N/V = \text{const}$. Заряди частинок рівні $Z_\alpha e$, де e – абсолютне значення величини заряду електрона, а $Z_\alpha \in \mathbb{Z}$. Система в цілому є електронейтральною. Це означає, що у випадку різноманітності заряджених частинок виконується умова електронейтральності $\sum_{\alpha=1}^M N_\alpha Z_\alpha = 0$. У протилежному випадку, коли розглядаються лише позитивно заряджені іони (суміші іонізованих газів), нейтралізуюче поле електронів вважається континуумом, що є скрізь однаковим, постійним та нечутливим до змін в системі позитивно заряджених іонів.

Гамільтоніан системи можна представити у такому вигляді:

$$H = \sum_{\alpha=1}^M \sum_{j_{\alpha}=1}^{N_{\alpha}} \frac{p_{j_{\alpha}}}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^M \sum_{\beta=1}^M \sum_{j_{\alpha}=1}^{N_{\alpha}} \sum_{k_{\beta}=1}^{N_{\beta}} \Phi(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}} - \mathbf{r}_{k_{\beta}}|),$$

$j_{\alpha} \neq k_{\beta}$ при $\alpha = \beta$

де

$$\Phi(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}} - \mathbf{r}_{k_{\beta}}|) = \Phi(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}|) = \Phi^{hs}(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}|) + \Phi^l(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}|)$$

є повним потенціалом міжчастинкової взаємодії, що складається з близькосяжної (твердосферної) $\Phi^{hs}(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}|)$ та далекосяжної (у нашому випадку – кулонівської) $\Phi^l(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}|)$ взаємодій:

$$\Phi^{hs}(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}|) = \lim_{c \rightarrow \infty} \Phi^c(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}|) = \begin{cases} c, & |\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}| < \sigma_{\alpha\beta}, \\ 0, & |\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}| > \sigma_{\alpha\beta}, \end{cases}$$

$$\Phi^l(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}|) = \begin{cases} 0, & |\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}| < \sigma_{\alpha\beta}, \\ \frac{Z_{\alpha}Z_{\beta}\epsilon^2}{|\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}|}, & |\mathbf{r}_{j_{\alpha}k_{\beta}}| > \sigma_{\alpha\beta}. \end{cases}$$

Стан такої системи описується класичною нерівноважною N -частинковою функцією розподілу $\varrho(x^N; t)$. Розглянемо далі детально випадок двосортної системи, тобто випадок, коли $M = 2$. Тоді нерівноважна N -частинкова функція розподілу $\varrho(x^N; t)$ є

$$\begin{aligned} \varrho(x^N; t) &= \varrho((x^a)^{N_a}, (x^b)^{N_b}; t) \\ &= \varrho(x_1^a, x_2^a, \dots, x_{N_a}^a, x_1^b, x_2^b, \dots, x_{N_b}^b; t), \end{aligned}$$

задовільняє рівняння Ліувіля та умову нормування [1,2]. Однак у двосортному випадку N -частинковий оператор Ліувіля матиме нову структуру, що враховує багатосортність системи, а саме:

$$L_N = \sum_{\alpha=1}^M \sum_{j_{\alpha}=1}^{N_{\alpha}} L(j_{\alpha}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^M \sum_{\beta=1}^M \sum_{j_{\alpha}=1}^{N_{\alpha}} \sum_{k_{\beta}=1}^{N_{\beta}} L(j_{\alpha}, k_{\beta}),$$

$j_{\alpha} \neq k_{\beta}$ при $\alpha = \beta$

$$L(j_{\alpha}) = -i \frac{\mathbf{p}_{j_{\alpha}}}{m_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{j_{\alpha}}},$$

$$L(j_{\alpha}, k_{\beta}) = i \frac{\partial \Phi(|\mathbf{r}_{j_{\alpha}} - \mathbf{r}_{k_{\beta}}|)}{\partial \mathbf{r}_{j_{\alpha}}} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_{j_{\alpha}}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_{k_{\beta}}} \right).$$

3. Кінетичне рівняння

Кінетичне рівняння для одночастинкової функції розподілу частинок сорту α $f_1(x_1^{\alpha}; t)$ можна отримати так само, як і для випадку односортної системи з тим, що будуть зміни пов'язані з багатосортністю системи. Зокрема, у наближенні “парних” зіткнень це рівняння матиме такий вигляд:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL(1_{\alpha}) \right) f_1(x_1^{\alpha}; t) = - \sum_{\beta=1}^M \int dx_2^{\beta} iL(1_{\alpha}, 2_{\beta}) \times \quad (3.1)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} e^{iL_2\tau} g_2(\mathbf{r}_1^{\alpha}, \mathbf{r}_2^{\beta}; t + \tau) f_1(x_1^{\alpha}; t + \tau) f_1(x_2^{\beta}; t + \tau),$$

де

$$g_2(\mathbf{r}_1^{\alpha}, \mathbf{r}_2^{\beta}; t) = [n(\mathbf{r}_1^{\alpha}; t)n(\mathbf{r}_2^{\beta}; t)]^{-1} f_2(\mathbf{r}_1^{\alpha}, \mathbf{r}_2^{\beta}; t),$$

$$f_2(\mathbf{r}_1^{\alpha}, \mathbf{r}_2^{\beta}; t) = \int d\Gamma'_N n_2(\mathbf{r}_1^{\alpha}, \mathbf{r}_2^{\beta}(x')^N; t) \varrho_q((x')^N; t).$$

Рівняння (3.1) формально відрізняється від аналогічного рівняння для односортної системи лише наявністю сумування за сортами у своїй правій частині (в інтегралі зіткнень). З (3.1) кінетичне рівняння Енскога-Ландау для двокомпонентної системи заряджених твердих сфер було вперше отримане в [29] і має вигляд:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + iL(1_{\alpha}) \right] f_1(x_1^{\alpha}; t) = \quad (3.2)$$

$$I_E^{(0)}(x_1^{\alpha}; t) + I_E^{(1)}(x_1^{\alpha}; t) + I_{MF}(x_1^{\alpha}; t) + I_L(x_1^{\alpha}; t),$$

де доданки справа є інтегралами зіткнень, що обумовлені вкладом від певного типу міжчастинкової взаємодії. Перший та другий з них – інтеграли зіткнень типу Енскога теорії RET [1,2]:

$$I_E^{(0)}(x_1^{\alpha}; t) = \sum_{\beta=1}^M \int d\mathbf{v}_2^{\beta} d\epsilon db b g^{\alpha\beta} g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n, \beta) \times \quad (3.3)$$

$$\left(f_1(\mathbf{r}_1^{\alpha}, \mathbf{v}_1^{\alpha'}; t) f_1(\mathbf{r}_2^{\beta}, \mathbf{v}_2^{\beta'}; t) - f_1(\mathbf{r}_1^{\alpha}, \mathbf{v}_1^{\alpha}; t) f_1(\mathbf{r}_2^{\beta}, \mathbf{v}_2^{\beta}; t) \right),$$

$$I_E^{(1)}(x_1^{\alpha}; t) = \sum_{\beta=1}^M \sigma_{\alpha\beta}^3 \int d\hat{\mathbf{r}}_{12}^{\alpha\beta} d\mathbf{v}_2^{\beta} \Theta(\hat{\mathbf{r}}_{12}^{\alpha\beta} \cdot \mathbf{g}^{\alpha\beta}) (\hat{\mathbf{r}}_{12}^{\alpha\beta} \cdot \mathbf{g}^{\alpha\beta}) \times$$

$$\begin{aligned}
& \left[\hat{\mathbf{r}}_{12}^{\alpha\beta} g_2^{\alpha\beta}(\mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta} | n, \beta) \times \right. \\
& \left. \left[f_1(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{v}_1^{\alpha'}; t) \nabla f_1(\mathbf{r}_2^\beta, \mathbf{v}_2^{\beta'}; t) - f_1(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{v}_1^\alpha; t) \nabla f_1(\mathbf{r}_2^\beta, \mathbf{v}_2^\beta; t) \right] + \right. \\
& \left. \frac{1}{2} \left[\hat{\mathbf{r}}_{12}^{\alpha\beta} \cdot \nabla g_2^{\alpha\beta}(\mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta} | n, \beta) \right] \times \right. \\
& \left. \left[f_1(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{v}_1^{\alpha'}; t) f_1(\mathbf{r}_2^\beta, \mathbf{v}_2^{\beta'}; t) + f_1(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{v}_1^\alpha; t) f_1(\mathbf{r}_2^\beta, \mathbf{v}_2^\beta; t) \right] \right],
\end{aligned} \quad (3.4)$$

наступний доданок – це вклад, розрахований у наближенні теорії середнього поля KMFT [1,2]:

$$\begin{aligned}
I_{MF}(x_1^\alpha; t) = & \quad (3.5) \\
& \frac{1}{m_\alpha} \sum_{\beta=1}^M \int d\mathbf{r}_2^\beta \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1^\alpha} \Phi^l(|\mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta}|) g_2^{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{r}_2^\beta; t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1^\alpha} f_1(x_1^\alpha; t) n_\beta(\mathbf{r}_1^\beta; t),
\end{aligned}$$

останній доданок є інтегралом зіткнень типу Ландау [1,2]:

$$\begin{aligned}
I_L(x_1^\alpha; t) = & \sum_{\beta=1}^M \int d\mathbf{v}_2^\beta d\varepsilon db b g^{\alpha\beta} \times \\
& \left(f_1(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{v}_1^{\alpha*}; t) f_1(\mathbf{r}_2^\beta, \mathbf{v}_2^{\beta*}; t) - f_1(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{v}_1^\alpha; t) f_1(\mathbf{r}_2^\beta, \mathbf{v}_2^\beta; t) \right).
\end{aligned} \quad (3.6)$$

Тут він представлений спрощено у бoльцманівськоподібній формі. Цю формулу можна отримати шляхом переходу до циліндричної системи координат, вводячи прицільний параметр b , азимутальний кут розсіяння ε , відстань по осі циліндра ξ і, інтегруючи по ξ з врахуванням $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) \rightarrow 1$. При розв'язуванні рівняння методом Чепмена-Енскога така форма є зручною. Інші позначення використані у формулах (3.3) – (3.6), є такими:

b	прицільний параметр,
β	аналог локальної оберненої температури,
ε	азимутальний кут розсіяння,
$\mathbf{g}^{\alpha\beta}$	відносна швидкість частинок сортів α та β ,
$g_2^{\alpha\beta}$	двочастинкова кореляційна функція,
m^*	приведена маса,
m_α	парціальні маси частинок,
n	повна густина числа частинок,
n_α	парціальні густини числа частинок,
$\hat{\mathbf{r}}_{12}^{\alpha\beta}$	одиничний вектор вздовж напрямку $\mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta}$,
$\Theta(x)$	одинична сходинкова функція Хевісайда.

Крім цього, $\mathbf{v}_1^{\alpha'}$, $\mathbf{v}_2^{\alpha'}$ – швидкості твердих сфер після зіткнення:

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_1^{\alpha'} &= \mathbf{v}_1^\alpha + \hat{\mathbf{r}}_{12}^{\alpha\beta} (\hat{\mathbf{r}}_{12}^{\alpha\beta} \cdot \mathbf{g}^{\alpha\beta}), \\
\mathbf{v}_2^{\beta'} &= \mathbf{v}_2^\beta - \hat{\mathbf{r}}_{12}^{\alpha\beta} (\hat{\mathbf{r}}_{12}^{\alpha\beta} \cdot \mathbf{g}^{\alpha\beta}),
\end{aligned}$$

$\mathbf{v}_1^{\alpha*}$, $\mathbf{v}_2^{\beta*}$ – швидкості частинок після кулонівського розсіяння:

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_1^{\alpha*} &= \mathbf{v}_1^\alpha + \Delta \mathbf{v}^{\alpha\beta}, \\
\mathbf{v}_2^{\beta*} &= \mathbf{v}_2^\beta - \Delta \mathbf{v}^{\alpha\beta},
\end{aligned}$$

$$\Delta \mathbf{v}^{\alpha\beta} = -\frac{1}{m^*} \int d\xi \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta}} \Phi^l(|\mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta}|) \frac{1}{g^{\alpha\beta}} \Big|_{\mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta} = \sqrt{b^2 + \xi^2}}.$$

4. Нормальний розв'язок методом Чепмена-Енскога у першому наближенні

Як і звичайно, при розв'язуванні кінетичного рівняння методом Чепмена-Енскога у k^{-y} наближенні будемо використовувати закони збереження для адитивних інваріантів у $(k-1)^{-y}$ наближенні. Параметрами скороченого опису виберемо так само, як і в [2,3], гідродинамічні густини маси, імпульсу та енергії:

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{r}_1; t) &= \sum_{\alpha=1}^M \int d\mathbf{v}_1^\alpha f_1(x_1^\alpha; t) m_\alpha, \\
\rho(\mathbf{r}_1; t) \mathbf{V}(\mathbf{r}_1; t) &= \sum_{\alpha=1}^M \int d\mathbf{v}_1^\alpha f_1(x_1^\alpha; t) m_\alpha \mathbf{v}_1^\alpha, \\
\rho(\mathbf{r}_1; t) \omega_k(\mathbf{r}_1; t) &= \sum_{\alpha=1}^M \int d\mathbf{v}_1^\alpha f_1(x_1^\alpha; t) \frac{m_\alpha (c_1^\alpha)^2}{2}.
\end{aligned}$$

Закон збереження для $\rho(\mathbf{r}_1; t)$ матиме вид рівняння неперервності, тоді як для рівняння руху та рівняння балансу енергії отримаємо наступне:

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{r}_1; t) \frac{d\mathbf{V}(\mathbf{r}_1; t)}{dt} &= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{P}}'(\mathbf{r}_1; t), \quad (4.1) \\
\rho(\mathbf{r}_1; t) \frac{d\omega_k(\mathbf{r}_1; t)}{dt} &= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \mathbf{q}^*(\mathbf{r}_1; t) - \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{P}}^*(\mathbf{r}_1; t) : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \mathbf{V}(\mathbf{r}_1; t) + \\
& \sum_{\alpha, \beta}^M \mathbf{V}_d^\alpha(\mathbf{r}_1; t) \int d\mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta}} \Phi^l(|\mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta}|) n_\alpha(\mathbf{r}_1^\alpha; t) n_\beta(\mathbf{r}_1^\alpha + \mathbf{r}_{12}^{\alpha\beta}; t),
\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}\overleftrightarrow{P}'(\mathbf{r}_1; t) &= \overleftrightarrow{P}^k(\mathbf{r}_1; t) + \overleftrightarrow{P}^{hs}(\mathbf{r}_1; t) + \overleftrightarrow{P}^{mf}(\mathbf{r}_1; t), \\ \overleftrightarrow{P}^*(\mathbf{r}_1; t) &= \overleftrightarrow{P}^k(\mathbf{r}_1; t) + \overleftrightarrow{P}^{hs}(\mathbf{r}_1; t), \\ \mathbf{q}^*(\mathbf{r}_1; t) &= \mathbf{q}^k(\mathbf{r}_1; t) + \mathbf{q}^{hs}(\mathbf{r}_1; t);\end{aligned}$$

$\mathbf{V}_d^\alpha(\mathbf{r}_1; t)$ – дифузійна швидкість частинок сорту α :

$$\mathbf{V}_d^\alpha(\mathbf{r}_1; t) = \langle \mathbf{c}^\alpha(\mathbf{r}_1; t) \rangle, \quad \mathbf{c}^\alpha(\mathbf{r}_1; t) = \mathbf{v}_1^\alpha - \mathbf{V}(\mathbf{r}_1; t),$$

$\langle \dots \rangle$ означає засереднення з одночастинковою функцією розподілу $f_1(x_1^\alpha; t)$. У нульовому наближенні, коли $f_1(x_1^\alpha; t)$ вибирається у вигляді локально-рівноважної максвелової функції розподілу

$$f_1^{(0)}(x_1^\alpha; t) = n_\alpha(\mathbf{r}_1^\alpha; t) \left(\frac{m_\alpha}{2\pi kT(\mathbf{r}_1^\alpha; t)} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m_\alpha (c_1^\alpha(\mathbf{r}_1^\alpha; t))^2}{2kT(\mathbf{r}_1^\alpha; t)} \right\},$$

для величин $\overleftrightarrow{P}'(\mathbf{r}_1; t)$, $\mathbf{q}^*(\mathbf{r}_1; t)$, $\mathbf{V}_d^\alpha(\mathbf{r}_1; t)$ одержимо такі вирази:

$$\overleftrightarrow{P}^k = \overleftrightarrow{I}P^k, \quad P^k = \sum_{\alpha=1}^M n_\alpha kT, \quad (4.2)$$

$$\overleftrightarrow{P}^{hs} = \overleftrightarrow{I}P^{hs}, \quad P^{hs} = \frac{2}{3}\pi kT \sum_{\alpha, \beta} n_\alpha n_\beta \sigma_{\alpha\beta}^3 g_2^{\alpha\beta}(\sigma|n, \beta),$$

$$\overleftrightarrow{P}^{mf} = \overleftrightarrow{I}P^{mf}, \quad P^{mf} = -\frac{2}{3}\pi \sum_{\alpha, \beta} n_\alpha n_\beta \int_{\sigma_{\alpha\beta}}^{\infty} dx x^3 (\Phi_{\alpha\beta}^l(x))' g_2^{\alpha\beta}(x),$$

$$\overleftrightarrow{P}^l = 0, \quad \mathbf{q}^k = \mathbf{q}^{hs} = \mathbf{q}^{mf} = \mathbf{q}^l = 0, \quad \mathbf{V}_d^\alpha(\mathbf{r}_1; t) = 0.$$

Використовуючи закон збереження маси та рівняння (4.1) у нульовому наближенні з врахуванням виду для $\overleftrightarrow{P}'(\mathbf{r}_1; t)$, $\overleftrightarrow{P}^*(\mathbf{r}_1; t)$, $\mathbf{q}^*(\mathbf{r}_1; t)$ та $\mathbf{V}_d^\alpha(\mathbf{r}_1; t)$ (4.2), будемо шукати розв'язок рівняння (3.2) у першому наближенні в формі:

$$f_1(x_1^\alpha; t) = f_1^{(0)}(x_1^\alpha; t)(1 + \varphi(x_1^\alpha; t)), \quad (4.3)$$

де поправка $\varphi(x_1^\alpha; t)$ записується через поліноми Соніна-Лагера:

$$\begin{aligned}\varphi(x_1^\alpha; t) &= -\sqrt{\frac{m_\alpha}{2kT}} E^\alpha \left(\frac{m_\alpha (c_1^\alpha)^2}{2kT} \right) n c_1^\alpha \mathbf{d}^\alpha \\ &\quad - \sqrt{\frac{m_\alpha}{2kT}} A^\alpha \left(\frac{m_\alpha (c_1^\alpha)^2}{2kT} \right) c_1^\alpha \nabla \ln T \\ &\quad - \frac{m_\alpha}{2kT} B^\alpha \left(\frac{m_\alpha (c_1^\alpha)^2}{2kT} \right) \left(c_1^\alpha c_1^\alpha - \frac{1}{3} (c_1^\alpha)^2 \overleftrightarrow{I} \right).\end{aligned}$$

Тут

$$E^\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n^\alpha L_n^{3/2}(x),$$

$$A^\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n^\alpha L_n^{3/2}(x),$$

$$B^\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n^\alpha L_n^{5/2}(x),$$

$$L_n^r(x) = \sum_{m=0}^n (-1)^m x^m \frac{n! \Gamma(n+r+1)}{m! \Gamma(m+r+1) \Gamma(n-m+1)},$$

$\mathbf{d}^\alpha \equiv \mathbf{d}^\alpha(\mathbf{r}_1^\alpha; t)$ – дифузійна термодинамічна сила α -компоненти суміші [31]. Для величин \mathbf{d}^α виконується рівність:

$$\sum_{\alpha=1}^M \mathbf{d}^\alpha(\mathbf{r}_1^\alpha; t) = 0.$$

В односортному випадку дифузійні термодинамічні сили відсутні.

Підстановка розв'язку (4.3) в рівняння (3.2) зведе його до неоднорідного інтегрального рівняння типу Фредгольма. Тому відразу можна записати додаткові умови для його розв'язування: це ортогональність правої частини (3.2) до розв'язків відповідного однорідного рівняння. Оскільки останніми є параметри скороченого гідродинамічного опису, то додаткові умови після математичних перетворень наберуть виду:

$$E_0^b = -\frac{n_a}{n_b} \sqrt{\frac{m_a}{m_b}} E_0^a,$$

$$A_0^b = -\frac{n_a}{n_b} \sqrt{\frac{m_a}{m_b}} A_0^a.$$

Це слід враховувати при знаходженні коефіцієнтів розкладу E_n^α , A_n^α , B_n^α . Тоді виникає кілька незалежних нескінченних систем рівнянь. Знайти точний розв'язок таких систем неможливо. Доводиться обмежуватись кількома першими членами розкладу. На практиці [31] шукають, як правило, лише величини E_0^α , B_0^α та A_0^α , A_1^α . Крім того, слід також мати на увазі те, що зіткнення однакових частинок дає нульовий вклад в силу виконання при пружному розсіянні законів збереження маси, імпульсу та енергії.

Основні рівняння для знаходження коефіцієнтів A_0^α , A_1^α та їх символічний розв'язок представлено в додатку А. Те ж саме зроблено для величин B_0^α в додатку В.

5. Коефіцієнти переносу

Враховуючи (4.3) – представлення для одночастинкової функції розподілу у першому наближенні, можна записати вираз для густини потоку маси α -компоненти суміші [32]:

$$\mathbf{j}^\alpha(\mathbf{r}_1^\alpha; t) = -\rho^{-1} n^2 m_\alpha m_\beta D^{\alpha\beta} \mathbf{d}^\alpha(\mathbf{r}_1^\alpha; t) - D_T^\alpha \nabla \ln T(\mathbf{r}_1^\alpha; t),$$

де $D^{\alpha\beta}$ – коефіцієнт взаємної дифузії, а D_T^α – коефіцієнт термодифузії α -компоненти суміші. В наближенні нульового полінома

$$D^{\alpha\beta} = -\frac{n_\alpha \rho}{m_\beta n} \sqrt{\frac{kT}{2m_\alpha}} E_0^\alpha, \quad (5.1)$$

$$D_T^\alpha = m_\alpha n_\alpha \sqrt{\frac{kT}{2m_\alpha}} A_0^\alpha. \quad (5.2)$$

Звідси легко записати вираз для термодифузійного співвідношення:

$$k_T = \frac{\rho}{n^2 m_\alpha m_\beta} \frac{D_T}{D^{\alpha\beta}} = -\frac{1}{n} \frac{A_0^\alpha}{E_0^\alpha}.$$

Остаточний вираз для коефіцієнтів термодифузії можна записати із врахуванням виду A_0^α з додатку А. Для обчислення величин E_0^α зручно перейти до нових змінних – змінних центру інерції. При таких перетвореннях ці величини розраховуються точно. Це дає змогу записати вираз для коефіцієнта взаємної дифузії в аналітичному вигляді:

$$E_0^\alpha = -\frac{3\pi m_\beta}{8\rho n_\alpha} \sqrt{\frac{\pi m_\alpha}{m^*}} \left(g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n, \beta) \alpha^\beta \Omega_{h_s}^{(1,1)} + \alpha^\beta \Omega_l^{(1,1)} \right)^{-1},$$

$$D^{\alpha\beta} = \frac{3\pi}{8n} \sqrt{\frac{\pi kT}{2m^*}} \left(g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n, \beta) \alpha^\beta \Omega_{h_s}^{(1,1)} + \alpha^\beta \Omega_l^{(1,1)} \right)^{-1}.$$

Величини $\alpha^\beta \Omega_{h_s}^{(r,p)}$, $\alpha^\beta \Omega_l^{(r,p)}$ – це Ω -інтеграли [33]. Їх означення і розрахунок подано в додатку С.

Крім коефіцієнтів термодифузії та взаємної дифузії в першому наближенні можна розрахувати також тензор в'язких напружень $\vec{\vec{P}}'(\mathbf{r}_1; t)$ та вектор теплового потоку $\mathbf{q}^*(\mathbf{r}_1; t)$ й отримати інші кінетичні коефіцієнти. Розрахунки дадуть:

$$\vec{\vec{P}}'(\mathbf{r}_1; t) = P(\mathbf{r}_1; t) \vec{\vec{I}} - \kappa(\nabla : \mathbf{V}(\mathbf{r}_1; t)) - 2\eta \vec{\vec{S}}(\mathbf{r}_1; t),$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}_1; t) = -\lambda \nabla T(\mathbf{r}_1; t) + \sum_{\alpha=1}^M \omega_\alpha \mathbf{d}^\alpha.$$

Тут κ – сумарний коефіцієнт об'ємної в'язкості суміші:

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{8}{9} \sum_{\alpha, \beta=1}^M \sigma_{\alpha\beta}^4 g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n, \beta) n_\alpha n_\beta \frac{m^*}{m_\beta} \sqrt{2\pi m^* kT} \\ &= \sum_{\alpha, \beta=1}^M \kappa_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (5.3)$$

η – сумарний коефіцієнт зсувної в'язкості суміші:

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{3}{5} \kappa + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^M n_\alpha kT \times \\ &\left[1 + \frac{2\pi}{15} \sum_{\beta=1}^M n_\beta \sigma_{\alpha\beta}^3 g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n, \beta) \left[1 + \frac{m_\alpha B_0^\beta}{m_\beta B_0^\alpha} \right] \right] B_0^\alpha, \end{aligned} \quad (5.4)$$

λ – сумарний коефіцієнт теплопровідності суміші:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{3}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^M k m_\alpha m_\beta \left[\frac{1}{2} (m_\alpha + m_\beta) - \frac{1}{8} \frac{(m_\alpha - m_\beta)^2}{m_\alpha + m_\beta} \right]^{-3} \kappa_{\alpha\beta} + \\ &\frac{5}{4} \sum_{\alpha=1}^M n_\alpha k \sqrt{\frac{2kT}{m_\alpha}} \times \\ &\left[1 - \frac{A_0^\alpha}{A_1^\alpha} + \frac{\pi}{5} \sum_{\beta=1}^M n_\beta \sigma_{\alpha\beta}^3 g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n, \beta) \left[1 + \frac{m_\alpha^{3/2} A_1^\beta}{m_\beta^{3/2} A_1^\alpha} \right] \right] A_1^\alpha, \\ \omega_\alpha &= \frac{5}{4} n n_\alpha \sqrt{\frac{2k^3 T^3}{m_\alpha}} E_0^\alpha. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Для отриманих коефіцієнтів переносу (5.1) – (5.5) важливо розглянути граничний випадок, коли кількість сортів $M = 1$. Тоді мають отримуватись результати випадку однокомпонентної системи заряджених твердих сфер у компенсуючому полі [2]. У цьому неважко переконатись, якщо покласти

$$m_a = m_b = m,$$

$$n_a + n_b = n,$$

$$E_0^\alpha = A_0^\alpha = 0,$$

$$B_0^\alpha = B_0^\beta = B_0.$$

Отже в такій системі дифузії та термодифузії не буде (внаслідок відсутності \mathbf{d}^α). А рівність $A_0^\alpha = 0$ виникає внаслідок умови Фредгольма.

6. Чисельні розрахунки

Для величин $D^{\alpha\beta}$ (5.1), D_T^α (5.2), κ (5.3) та η (5.4) були здійснені чисельні розрахунки. Об'єктом дослідження вибрано суміші інертних газів: Ar-Kr, Ar-Xe, Kr-Xe. Нейтральні й заряджені суміші таких газів краще підходять під модель заряджених твердих сфер, що тут розглядається, ніж якісь інші суміші, де компоненти можуть мати складну молекулярну структуру. Коефіцієнти переносу розраховувались при кількох фіксованих безрозмірних густинах у широкому фізично реальному для цих сумішей інтервалі температур.

Для нейтральних систем ($Z_\alpha = 0$) результати для деяких кінетичних коефіцієнтів порівнюються з аналогічними результатами для ленард-джонсівських рідин. Зокрема, в таблиці D. наведено порівняння для зсувної в'язкості та взаємної дифузії суміші Ar-Kr, що розраховувались для рідини методами молекулярної динаміки [34,35] та кінетичної теорії ефективного діаметра твердих сфер [36] і методом Чепмена-Енскога (дана робота) для газової суміші, додаток D. При однакових порядках величин для в'язкості у рідині вона вища, ніж у газової суміші, як і повинно бути. А для коефіцієнта взаємної дифузії навпаки: при однакових порядках величин у газової суміші він вищий, ніж у рідині, що також є фізично вірно.

В інших роботах [37–40] було знайдено результати вимірювань для зсувної в'язкості лише аргонної компоненти в нейтральній суміші. Значення параметрів теорії (σ_α) брались з [41–45]. Співпадіння з теорією є добре.

На рисунках 1-60 зображено графічні залежності коефіцієнтів переносу $D^{\alpha\beta}$, D_T^α , κ та η від температури при певних фіксованих характерних густинах. Залежності для одних і тих самих коефіцієнтів переносу подано попарно: нейтральна суміш ($Z_\alpha = 0$) – заряджена суміш ($Z_\alpha \neq 0$). Це дозволяє відразу візуально спостерігати як міняється характер поведінки цих коефіцієнтів при включенні далекосяжної взаємодії ($Z_\alpha \neq 0$). Не міняє характеру поведінки лише об'ємна в'язкість κ , оскільки ця величина не залежить від Z_α .

На рисунках 1-20 розрахунки проводились для випадку, коли обидві компоненти суміші однаково представлені: $n_\alpha = n_\beta$. На рисунках 21-40 легшої компоненти суміші є вдвічі більше, ніж важчої. Це приводить іноді до суттєвої зміни ходу ліній на рисунках. Наприклад, коефіцієнти термодифузії для Kr та Xe майже зрівнялись (рисунки 40). Якщо при однакових концентраціях вклад легшої компоненти суміші в сумарну величину зсувної в'язкості був меншим (рисунки 4, 10, 16), то тепер він спочатку є переважаючим. Але при зростанні температури проявляється домінування важчої компоненти, і при певному значенні T (різному для кожної суміші) цей вклад знову є більшим (рисунки 24, 30, 36). На рисунках 41-60 розрахунки проводились для випадку, коли важчої компоненти суміші є вдвічі більше, ніж легшої. Форма залежностей коефіцієнтів переносу від температури у цьому випадку залишилась такою ж, як і на рисунках 1-20. Однак різниця між парціальними вкладками компонент в сумарне значення величини коефіцієнта переносу зросла. Домінування вкладу важчих компонент суміші тут підсилилось, тоді як вклад легших компонент ще більше послабився.

На закінчення слід ще додати коментар стосовно вибору величин $g_2^{\alpha\beta}(r)$ та D , через які, зокрема, виражаються кінетичні коефіцієнти. Якщо для останніх в рамках методу Чепмена-Енскога отримано аналітичні вирази, то знаходження виду $g_2^{\alpha\beta}(r)$ та D є окремою задачею. Тому в даній роботі для них використано готові вже результати. Величина $D = 1/2\Gamma$ вибирається як розв'язок рівняння

$$4\Gamma^2 = \frac{e^2}{\epsilon_p} \sum_{\alpha=1}^M n_\alpha X_\alpha^2,$$

$$X_\alpha = \left[Z_\alpha - \frac{\pi}{2} \frac{\sigma_\alpha^2}{1-\Delta} P_m \right] [1 + \Gamma\sigma_\alpha]^{-1},$$

$$P_m = \sum_{\alpha=1}^M \frac{n_\alpha \sigma_\alpha Z_\alpha}{1 + \Gamma\sigma_\alpha} \left[1 + \frac{\pi}{2(1-\Delta)} \sum_{\alpha=1}^M \frac{n_\alpha \sigma_\alpha^3}{1 + \Gamma\sigma_\alpha} \right]^{-1},$$

$$\Delta = \sum_{\alpha=1}^M \Delta_{\alpha} r_{\alpha}^3, \quad \Delta_{\alpha} = \pi n_{\alpha} / 6,$$

запропонованого в [46]. А вираз для координатної функції розподілу $g_2^{\alpha\beta}(r)$ будувався на основі результатів робіт [47–50]. В [47] рівняння Перкуса-Йевіка для радіальної функції розподілу в рідині узагальнене на випадок M -компонентної суміші, в [48] $g_2^{\alpha\beta}(r)$ розраховується для іонних сумішей у випадку кулонівської та екранованої кулонівської взаємодій. Більш прецизійна формула для обчислення $g_2^{\alpha\beta}(r)$ на основі наближення Перкуса-Йевіка представлена в [49], а в [50] – нове замикання для рівняння Орнштейна-Церніке системи заряджених частинок із специфічним потенціалом взаємодії, теоретичні розрахунки порівнюються з результатами МС. При обчисленні коефіцієнтів переносу в даній роботі використовувалось одне з найпростіших представлень $g_2^{\alpha\beta}(r)$ на контакті, а саме:

$$\begin{aligned} g_2^{\alpha\alpha}(\sigma_{\alpha}) &= \left\{ \left(1 + \frac{\Delta}{2} \right) + \frac{3}{2} \Delta_{\beta} \sigma_{\beta}^2 (\sigma_{\alpha} - \sigma_{\beta}) \right\} (1 - \Delta)^{-2}, \\ g_2^{\beta\beta}(\sigma_{\beta}) &= \left\{ \left(1 + \frac{\Delta}{2} \right) + \frac{3}{2} \Delta_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2 (\sigma_{\beta} - \sigma_{\alpha}) \right\} (1 - \Delta)^{-2}, \\ g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}) &= \left[\sigma_{\beta} g_2^{\alpha\alpha}(\sigma_{\alpha}) + \sigma_{\alpha} g_2^{\beta\beta}(\sigma_{\beta}) \right] / 2\sigma_{\alpha\beta}, \\ g_2^{\beta\alpha}(\sigma_{\beta\alpha}) &= \left[\sigma_{\beta} g_2^{\alpha\alpha}(\sigma_{\alpha}) + \sigma_{\alpha} g_2^{\beta\beta}(\sigma_{\beta}) \right] / 2\sigma_{\alpha\beta}. \end{aligned}$$

Література

- [1] Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Омелян И.П., Токарчук М.В. О кинетических уравнениях для плотных газов и жидкостей. // ТМФ, 1991, том 87, No 1, с. 113 - 129.
- [2] Kobryn A.E., Morozov V.G., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Enskog-Landau kinetic equation. Calculation of the transport coefficients for charged hard spheres. // Physica A, 1996, vol. 230, No 1&2, p. 189-201.
- [3] Kobryn A.E., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Nonstationary solution to the Enskog-Landau kinetic equation using boundary conditions method. // Cond. Matt. Phys., 1996, No 8, p. 75-98.
- [4] Kobryn A.E., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Normal solution to the Enskog-Landau kinetic equation using boundary conditions method. // Phys. Lett. A, (to be published).
- [5] Зубарев Д.Н., Хонькин А.Д. Метод построения нормальных решений кинетических уравнений с помощью граничных условий. // ТМФ, 1972, том 11, No 3, с. 403-412.

- [6] Wallenborn J., Baus M. Kinetic theory of the shear viscosity of a strongly coupled classical one-component plasma. // Phys. Rev. A, 1978, vol. 18, Mo 4, p. 1737-1747.
- [7] Cauble R., Duderstadt J.J. Model kinetic theories of one-component plasmas. // Phys. Rev. A, 1981, vol. 23, p. 1969.
- [8] Santos A, Garzó V. Self-diffusion in a dilute gas under heat and momentum transport. // Phys. Rev. A, 1992, vol. 46, No 6, p. 3276-3287.
- [9] Erpenbeck J.J. Transport coefficients of hard-sphere mixtures I. // Phys. Rev. A, 1989, vol. 39, No 4, p. 4718.
- [10] Erpenbeck J.J. Transport coefficients of hard-sphere mixtures II. Diameter ratio 0.4 and mass ratio 0.03 at low density. // Phys. Rev. A, 1992, vol. 45, No 4, p. 2298-2307.
- [11] Назаренко И.И., Паневин И.Г. Упрощенный метод расчета электропроводности, электронной теплопроводности и термодиффузии аргона. // ТБТ, 1989, том 27, No 3, с. 482-489.
- [12] Yoshida N. Concentration dependence of the self-diffusion coefficient of hard spheres in solution. // Chem. Phys. Lett., 1983, vol. 101, No 6, p. 555-561.
- [13] Pas M.F., Zwolinski B.J. Computation of the transport coefficients of dense fluid neon, argon, krypton and xenon by molecular dynamics. // Mol. Phys., 1991, vol. 73, No 3, p. 471-481.
- [14] Pas M.F., Zwolinski B.J. Computation of the transport coefficients of binary mixtures of argon-krypton, krypton-xenon and argon-xenon by molecular dynamics. // Mol. Phys., 1991, vol. 73, No 3, p. 483-494.
- [15] Banach Z. Extended thermodynamics of fluids versus the revised Enskog equation. // Physica A, 1987, vol. 145, p. 105-138.
- [16] Grmela M., Garcia-Colin L.S. Compatibility of the Enskog kinetic theory with thermodynamics I. // Phys. Rev. A, 1980, vol. 22, No 3, p. 1295-1304.
- [17] Grmela M., Garcia-Colin L.S. Compatibility of the Enskog-like kinetic theory with thermodynamics II. Chemically reacting fluids. // Phys. Rev. A, 1980, vol. 22, No 3, p. 1305-1314.
- [18] Sarman S., Evans D.J. Heat flow and mass diffusion in binary Lennard-Jones mixtures I. // Phys. Rev. A, 1992, vol. 45, No 4, p. 2370-2379.
- [19] Sarman S., Evans D.J. Heat flow and mass diffusion in binary Lennard-Jones mixtures II. // Phys. Rev. A, 1992, vol. 46, No 2, p. 1960-1966.
- [20] Erpenbeck J.J., Wood W.W. Self-diffusion coefficient for the hard-sphere fluid. // Phys. Rev. A, 1991, vol. 43, No 8, p. 4254-4261.
- [21] Schaink H.M., Hoheisel C. Molecular-dynamics study of the velocity-autocorrelation function and the self-diffusion coefficient in multicomponent mixtures. // Phys. Rev. A, 1992, vol. 45, No 12, p. 8559-8565.
- [22] Галеев Р.И., Шурыгин В.Ю., Юльметьев Р.М. Вычисление сдвиговой вязкости и теплопроводности жидкого аргона методом сокращенного описания. // УФЖ, 1991, том 36, No 3, с. 396-400.
- [23] Pan S., Storvick T.S. Kinetic theory calculations of pressure effects of

- diffusion. // J. Chem. Phys., 1992, vol. 97, No 4, p. 2671-2681.
- [24] Мельников А.В., Тарасян К.Н. Об определении коэффициента теплопроводности плазмы. // ФП, 1991, том 17, No 7, с. 880-884.
- [25] Божокин С.В., Быков А.М. О процессах переноса в случайно-неоднородной плазме в магнитном поле. // ФП, 1990, том 16, No 6, с. 717-722.
- [26] Александров Н.Л., Кочетов И.В. Электронные коэффициенты переноса в неравновесной слабоионизованной плазме при наличии кулоновских столкновений. // ФП, 1991, том 17, No 6, с. 728-734.
- [27] Sarman S., Evans D.J., Baranyai A. Mutual and self-diffusion in fluids undergoing strong shear. // Phys. Rev. A, 1992, vol. 46, No 2, p. 893-902.
- [28] Rigby M., Smith E.B., Wakeham W.A., Matland G.C. The forces between molecules. Oxford, Clarendon Press, 1986.
- [29] Кобрин О.Є., Омелян І.П., Токарчук М.В. Кінетичне рівняння Енскога-Ландау для двокомпонентної густої плазми. Розв'язок, коефіцієнти переносу. / Препринт ІФКС-93-19У, Львів, 1993, 40 с.
- [30] Kobryn A.E., Omelyan I.P. Enskog-Landau kinetic equation for two-component dense plasma. The solution, transport coefficients. In: Proceedings, Contributed papers of International Conference "Physics in Ukraine", volume: Plasma physics. Kiev, June 22-27, 1993, p. 135-138.
- [31] Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов. М., Наука, 1971.
- [32] Cussler E.L. Multicomponent diffusion. Amsterdam, Elsevier, 1976.
- [33] Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М., Мир, 1976.
- [34] Michels J.P.J., Trapreniers N.J. // Physica A, 1985, vol. 133, p. 281.
- [35] Gardner P.J., Heyes D.M., Preston S.R. Molecular dynamic computer simulations of binary Lennard-Jones fluid mixtures: thermodynamics of mixing and transport coefficients. // Mol. Phys., 1991, vol. 73, No 1, p. 141-173.
- [36] Castillo R., Villaverde A.V., Orozco J. Prediction of transport properties for Lennard-Jones fluids and their binary mixtures using the effective-diameter hard-sphere kinetic theory. // Mol. Phys., 1991, vol. 74, No 6, p. 1315-1334.
- [37] Ely F.G., McQuarrie A.D. Calculation of dense fluid transport properties via equilibrium statistical mechanical perturbation theory. // J. Chem. Phys., 1974, vol. 60, No 11, p. 4105-4108.
- [38] Варгафтик Н.Б., Филиппов Л.П. Теплопроводность газов и жидкостей (справочные данные). М., Изд. стандартов, 1970.
- [39] Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М., Наука, 1972.
- [40] Таблицы физических величин. Справочник под редакцией академика И.К. Кикоина. М., Атомиздат, 1976.
- [41] Hanley H.J.M., Klein M.J. // J. Phys. Chem., 1972, vol. 76, p. 1743.
- [42] Hanley H.J.M. // J. Phys. Chem. Ref. Data, 1974, vol. 2, p. 619.
- [43] Hanley H.J.M., Watts R.O. Molecular dynamics studies of an $m - 6 - 8$

- fluid. // Physica A, 1975, vol. 79, No 4, p. 351-376.
- [44] U.Balucani, M.Zoppi. Dynamics of the liquid state. Oxford, Clarendon Press, 1994.
- [45] P.A.Egelstaff. An introduction to the liquid state, 2-nd edn. Oxford, Clarendon Press, 1994.
- [46] Blum L., Høye J.S. Mean spherical model for asymmetric electrolytes II. Thermodynamic properties and pair correlation function. // J. Phys. Chem., 1977, vol. 81, No 3, p. 1311-1316.
- [47] Lebowitz J.L. Exact solution of generalized Percus-Yevick equation for a mixture of hard spheres. // Phys. Rev., 1964, vol. 133, No 4A, p. 895-889.
- [48] Copestake A.P., Evans R. Charge ordering and the structure of ionic liquids: screened Coulomb versus Coulomb interionic potentials. // J. Phys. C, 1982, vol. 15, p. 4961-4974.
- [49] Kahl G., Pastore G. Percus-Yevick pair-distribution functions of a binary hard-sphere system covering the whole r -range. // J. Phys. A, 1991, vol. 24, p. 2995-3011.
- [50] Babu C.S., Ichiye T. New integral equation theory for primitive model ionic liquids: from electrolytes to molten salts. // J. Chem. Phys., 1994, vol. 100, No 12, p. 9147-9155.

А. Обчислення коефіцієнтів A_n^α

Дві взаємодоповнювані нескінченні системи рівнянь для знаходження коефіцієнтів A_n^α можна записати в такому вигляді:

$$\sum_{r=0}^{\infty} \left[\left(\alpha_{sr}^{(a)} + \alpha_{sr}^{(ab,a)} \right) A_r^a + \alpha_{sr}^{(ab,b)} A_r^b \right] = \beta_s^{(a)},$$

$$\sum_{r=0}^{\infty} \left[\left(\alpha_{sr}^{(b)} + \alpha_{sr}^{(ba,b)} \right) A_r^b + \alpha_{sr}^{(ba,a)} A_r^a \right] = \beta_s^{(b)},$$

де величини α_{sr} , β_s мають інтегральну структуру і виражаються через поліноми L_n^r . Загальні вирази для цих величин доволі громіздкі, їх форма залежить від структури інтегралу зіткнень, але загальна форма є однаковою і повністю представлена в [31]. Розглянемо випадок коли індекси r , s приймають лише два значення: нуль і одиниця, що відповідає наближенню першого полінома. Тоді система стає скінченною і її зручно записати в матричному вигляді:

$$\hat{a}_{ij} \hat{A}_j = \hat{b}_i,$$

$$\hat{A}_j = \text{col} \left(A_0^a, A_1^a, A_0^b, A_1^b \right), \quad \hat{b}_i = \text{col} \left(\beta_0^{(a)}, \beta_1^{(a)}, \beta_0^{(b)}, \beta_1^{(b)} \right),$$

матриця \hat{a}_{ij}

$$\begin{bmatrix} \alpha_{00}^{(ab,a)} = a_{11} & \alpha_{01}^{(ab,a)} = a_{12} & \alpha_{00}^{(ab,b)} = a_{13} & \alpha_{01}^{(ab,b)} = a_{14} \\ \alpha_{10}^{(ab,a)} = a_{21} & \alpha_{11}^{(ab,a)} + \alpha_{11}^{(a)} = a_{22} & \alpha_{10}^{(ab,b)} = a_{23} & \alpha_{11}^{(ab,b)} = a_{24} \\ \alpha_{00}^{(ba,a)} = a_{31} & \alpha_{01}^{(ba,a)} = a_{32} & \alpha_{00}^{(ba,b)} = a_{33} & \alpha_{01}^{(ba,b)} = a_{34} \\ \alpha_{10}^{(ba,a)} = a_{41} & \alpha_{11}^{(ba,a)} = a_{42} & \alpha_{10}^{(ba,b)} = a_{43} & \alpha_{11}^{(ba,b)} + \alpha_{11}^{(b)} = a_{44} \end{bmatrix}.$$

Звідси за методом Крамера відразу запишемо розв'язок:

$$A_0^a = \frac{1}{\det \hat{a}_{ij}} \begin{vmatrix} b_1 & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ b_2 & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ b_3 & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ b_4 & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix}, \quad A_1^a = \frac{1}{\det \hat{a}_{ij}} \begin{vmatrix} a_{11} & b_1 & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & b_2 & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & b_3 & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & b_4 & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix},$$

$$A_0^b = \frac{1}{\det \hat{a}_{ij}} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & b_1 & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & b_2 & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & b_3 & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & b_4 & a_{44} \end{vmatrix}, \quad A_1^b = \frac{1}{\det \hat{a}_{ij}} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{11} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{21} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{31} & a_{33} & b_3 \\ a_{41} & a_{41} & a_{43} & b_4 \end{vmatrix}.$$

Величини a_{ij} можуть бути розраховані й представлені через так звані Ω -інтеграли (дивись додаток С.). Тоді для них одержимо:

$$a_{11} = -n_a n_b \sqrt{\frac{32}{\pi}} \frac{m^*}{m_a} \left(g_2^{ab}(\sigma_{ab}|n, \beta)^{aa} \Omega_{hs}^{(1,1)} + {}^{aa} \Omega_l^{(1,1)} \right),$$

$$a_{12} = a_{21} = -n_a n_b \sqrt{\frac{32}{\pi}} \left(\frac{m^*}{m_a} \right)^2 \times$$

$$\left(g_2^{ab}(\sigma_{ab}|n, \beta) \left[\frac{5}{2} {}^{aa} \Omega_{hs}^{(1,1)} - {}^{aa} \Omega_{hs}^{(1,2)} \right] + \frac{5}{2} {}^{aa} \Omega_l^{(1,1)} - {}^{aa} \Omega_l^{(1,2)} \right),$$

$$a_{13} = 4n_a n_b \sqrt{\frac{m^*}{\pi m_b}} \left(g_2^{ab}(\sigma_{ab}|n, \beta)^{ab} \Omega_{hs}^{(1,1)} + {}^{ab} \Omega_l^{(1,1)} \right),$$

$$a_{14} = a_{23} = 4n_a n_b \sqrt{\pi} \left(\frac{m^*}{m_b} \right)^{3/2} \times$$

$$\left(g_2^{ab}(\sigma_{ab}|n, \beta) \left[\frac{5}{2} {}^{ab} \Omega_{hs}^{(1,1)} - {}^{ab} \Omega_{hs}^{(1,2)} \right] + \frac{5}{2} {}^{ab} \Omega_l^{(1,1)} - {}^{ab} \Omega_l^{(1,2)} \right),$$

$$a_{22} = -n_a n_b \sqrt{\frac{32}{\pi}} \left(\frac{m^*}{m_a} \right) \times$$

$$\left(g_2^{ab}(\sigma_{ab}|n, \beta) \left[\left\{ \frac{30}{4} \left(\frac{m^*}{m_b} \right)^2 + \frac{25}{4} \left(\frac{m^*}{m_a} \right)^2 \right\} {}^{aa} \Omega_{hs}^{(1,1)} - \right. \right.$$

$$\left. \left. 5 \left(\frac{m^*}{m_a} \right)^2 {}^{aa} \Omega_{hs}^{(1,2)} + \left(\frac{m^*}{m_a} \right)^2 {}^{aa} \Omega_{hs}^{(1,3)} + \frac{2m_a m_b}{(m_a + m_b)^2} {}^{aa} \Omega_{hs}^{(2,2)} \right] \right) +$$

$$\left[\left\{ \frac{30}{4} \left(\frac{m^*}{m_b} \right)^2 + \frac{25}{4} \left(\frac{m^*}{m_a} \right)^2 \right\} {}^{aa} \Omega_l^{(1,1)} - \right.$$

$$\left. \left. 5 \left(\frac{m^*}{m_a} \right)^2 {}^{aa} \Omega_l^{(1,2)} + \left(\frac{m^*}{m_a} \right)^2 {}^{aa} \Omega_l^{(1,3)} + \frac{2m_a m_b}{(m_a + m_b)^2} {}^{aa} \Omega_l^{(2,2)} \right] \right) +$$

$$n_a^2 \sqrt{\frac{8}{\pi}} \left(g_2^{aa}(\sigma_{ab}|n, \beta)^{aa} \Omega_{hs}^{(2,2)} + {}^{aa} \Omega_l^{(2,2)} \right),$$

$$a_{24} = 4n_a n_b \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{(m^*)^{5/2}}{m_a m_b^{3/2}} \times$$

$$\left(g_2^{ab}(\sigma_{ab}|n, \beta) \left(\frac{55}{4} {}^{ab} \Omega_{hs}^{(1,1)} - 5 {}^{ab} \Omega_{hs}^{(1,2)} + {}^{ab} \Omega_{hs}^{(1,3)} - 2 {}^{ab} \Omega_{hs}^{(2,2)} \right) + \right.$$

$$\left. \frac{55}{4} {}^{ab} \Omega_l^{(1,1)} - 5 {}^{ab} \Omega_l^{(1,2)} + {}^{ab} \Omega_l^{(1,3)} - 2 {}^{ab} \Omega_l^{(2,2)} \right).$$

Решта величин a_{ij} виражається через попередні простою заміною індексів $a \rightarrow b$ і навпаки $b \rightarrow a$:

$$\begin{array}{l|l} a_{31} = a_{13} & a \rightarrow b, b \rightarrow a, \\ a_{32} = a_{41} = a_{14} & a \rightarrow b, b \rightarrow a, \\ a_{33} = a_{11} & a \rightarrow b, b \rightarrow a, \\ a_{34} = a_{43} = a_{12} & a \rightarrow b, b \rightarrow a, \\ a_{42} = a_{24} & a \rightarrow b, b \rightarrow a, \\ a_{44} = a_{22} & a \rightarrow b, b \rightarrow a. \end{array}$$

Величини b_i в наближенні першого полінома розраховуються точно:

$$b_1 = \frac{5}{4} n_a \left(1 + \frac{2\pi}{5m_a} \sum_{\alpha=1}^s m_\alpha n_\alpha \sigma_{a\alpha}^3 g_2^{a\alpha}(\sigma_{a\alpha}|n, \beta) \right) -$$

$$\frac{n_a}{2} \left(\frac{5}{2} + \frac{\pi}{3} \sum_{\alpha=1}^s n_\alpha \sigma_{a\alpha}^3 g_2^{a\alpha}(\sigma_{a\alpha}|n, \beta) + \right.$$

$$\left. \frac{2\pi m_a}{3\rho} \sum_{\alpha, \beta=1}^s n_\alpha n_\beta \sigma_{\alpha\beta}^3 g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n, \beta) \right),$$

$$b_2 = -\frac{15}{4}n_a \left(1 + \frac{2\pi}{5m_a} \sum_{\alpha=1}^s m_\alpha n_\alpha \sigma_{a\alpha}^3 g_2^{a\alpha}(\sigma_{a\alpha}|n, \beta) \right),$$

$$b_3 = b_1 \quad | \quad a \rightarrow b, b \rightarrow a,$$

$$b_4 = b_2 \quad | \quad a \rightarrow b, b \rightarrow a,$$

де

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^s \rho_\alpha = \sum_{\alpha=1}^s m_\alpha n_\alpha.$$

В. Обчислення коефіцієнтів B_n^α

Дві взаємодоповнювані нескінченні системи рівнянь для знаходження коефіцієнтів B_n^α можна записати в такому вигляді:

$$\sum_{r=0}^{\infty} \left[\left(\gamma_{sr}^{(a)} + \gamma_{sr}^{(ab,a)} \right) B_r^a + \gamma_{sr}^{(ab,b)} B_r^b \right] = \zeta_s^{(a)},$$

$$\sum_{r=0}^{\infty} \left[\left(\gamma_{sr}^{(b)} + \alpha_{sr}^{(ba,b)} \right) B_r^b + \alpha_{sr}^{(ba,a)} B_r^a \right] = \zeta_s^{(b)},$$

де величини γ_{sr} , ζ_s мають інтегральну структуру і виражаються через поліноми L_n^r . Загальні вирази для цих величин доволі громіздкі, їх форма залежить від структури інтегралу зіткнень, але загальна форма є однаковою і повністю представлена в [31]. Розглянемо випадок коли індекси r , s приймають лише одне значення: нуль, що відповідає наближенню нульового полінома. Тоді система стає скінченною і її зручно записати в матричному вигляді:

$$\hat{c}_{ij} \hat{B}_j = \hat{d}_i,$$

$$\hat{B}_j = \text{col} \left(B_0^a, B_0^b \right), \quad \hat{d}_i = \text{col} \left(\zeta_0^{(a)}, \zeta_0^{(b)} \right),$$

матриця \hat{c}_{ij}

$$\left(\begin{array}{cc|cc} \gamma_{00}^{(ab,a)} + \gamma_{00}^{(a)} & = & c_{11} & \gamma_{00}^{(ab,b)} & = & c_{12} \\ \gamma_{00}^{(ba,a)} & = & c_{21} & \gamma_{00}^{(ba,b)} + \gamma_{00}^{(b)} & = & c_{22} \end{array} \right).$$

Звідси за методом Крамера відразу запишемо розв'язок:

$$B_0^a = \frac{1}{\det \hat{c}_{ij}} \begin{vmatrix} d_1 & c_{12} \\ d_2 & c_{22} \end{vmatrix}, \quad B_0^b = \frac{1}{\det \hat{c}_{ij}} \begin{vmatrix} c_{11} & d_1 \\ c_{21} & d_2 \end{vmatrix}.$$

Величини c_{ij} можуть бути розраховані й представлені через так звані Ω -інтеграли (дивись додаток С.). Тоді для них одержимо:

$$c_{11} = -n_a n_b \frac{8}{3} \sqrt{\frac{kT}{\pi m_a}} \frac{(m^*)^2}{m_a m_b} \times$$

$$\left(g_2^{ab}(\sigma_{ab}|n, \beta) \left[5^{aa} \Omega_{hs}^{(1,1)} + \frac{3m_b}{2m_a} \Omega_{hs}^{(2,2)} \right] + 5^{aa} \Omega_l^{(1,1)} + \frac{3m_b}{2m_a} \Omega_l^{(2,2)} \right)$$

$$+ 4n_a^2 \sqrt{\frac{kT}{\pi m_a}} \left(g_2^{aa}(\sigma_{ab}|n, \beta) \Omega_{hs}^{(2,2)} + \Omega_l^{(2,2)} \right),$$

$$c_{12} = \frac{8n_a n_b \sqrt{2kTm^*}}{3(m_a + m_b)} \times$$

$$\left(g_2^{ab}(\sigma_{ab}|n, \beta) \left[5^{ab} \Omega_{hs}^{(1,1)} - \frac{3}{2} \Omega_{hs}^{(2,2)} \right] + 5^{ab} \Omega_l^{(1,1)} - \frac{3}{2} \Omega_l^{(2,2)} \right).$$

Решта величин c_{ij} виражається через попередні простою заміною індексів $a \rightarrow b$ і навпаки $b \rightarrow a$:

$$c_{21} = c_{12} \quad | \quad a \rightarrow b, b \rightarrow a,$$

$$c_{22} = c_{11} \quad | \quad a \rightarrow b, b \rightarrow a.$$

Величини d_i в наближенні нульового полінома розраховуються точно:

$$d_1 = n_a \frac{5}{2} \left(1 + \frac{2\pi}{3n} \sum_{\alpha, \beta=1}^s n_\alpha n_\beta \sigma_{\alpha\beta}^3 g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n, \beta) - \frac{2\pi}{3m_a} \sum_{\alpha=1}^s m_\alpha n_\alpha \sigma_{a\alpha}^3 g_2^{a\alpha}(\sigma_{a\alpha}|n, \beta) \right) - \frac{\pi n_a}{3} \sum_{\alpha=1}^s \left[n_\alpha \sigma_{a\alpha}^3 g_2^{a\alpha}(\sigma_{a\alpha}|n, \beta) - \sum_{\beta=1}^s \frac{n_\alpha n_\beta}{n} \sigma_{\alpha\beta}^3 g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n, \beta) \right] + \frac{117\pi n_a}{56} \left(1 + \frac{4\pi}{15m_a} \sum_{\alpha=1}^s m_\alpha n_\alpha \sigma_{a\alpha}^3 g_2^{a\alpha}(\sigma_{a\alpha}|n, \beta) \right),$$

$$d_2 = d_1 \quad | \quad a \rightarrow b, b \rightarrow a.$$

С. Ω -інтеграли

Ω -інтеграли виникають при обчисленні інтегралів зіткнень (інтегральних дужок [33]) в кінетичній теорії газів, рідин та плазми. Конкретний вид Ω -інтегралу залежить від типу міжчастинкової взаємодії, що враховується. У розглядуваному випадку повний потенціал міжчастинкової взаємодії складається з твердосферної та кулонівської частин. Тому буде два типи Ω -інтегралів.

$$\begin{aligned}\alpha\beta\Omega_{hs}^{(r,p)} &= \int_0^\infty dy e^{-y^2} y^{2p+3} \alpha\beta\Omega_{hs}^{(r)}, \\ \alpha\beta\Omega_l^{(r,p)} &= \int_0^\infty dy e^{-y^2} y^{2p+3} \alpha\beta\Omega_l^{(r)}, \\ \alpha\beta\Omega_{hs}^{(r)} &= 2\pi \int_0^{\sigma_{\alpha\beta}} db b \left[1 - \cos^r \left({}^{\alpha\beta}\chi'(b, y) \right) \right], \\ \alpha\beta\Omega_l^{(r)} &= 2\pi \int_{\sigma_{\alpha\beta}}^\infty db b \left[1 - \cos^r \left({}^{\alpha\beta}\chi^*(b, y) \right) \right].\end{aligned}$$

Тут χ' – кут розсіяння твердих сфер після зіткнення, χ^* – кут розсіяння заряджених частинок. В загальному випадку обидва кути є складними функціями багатьох чинників:

$$\chi = \pi - 2b \int_{r_0}^\infty dr r^2 \left(1 - \frac{b}{r^2} - \frac{2\Phi(r)}{m^*g^2} \right)^{-1/2},$$

m^* – приведена маса, значення r_0 шукається з умови екстремуму

$$r_0^2 - b^2 - \frac{2r_0^2}{m^*g^2}\Phi(r_0) = 0.$$

Виходячи з геометричних міркувань χ' можна розрахувати точно [33]:

$$\cos({}^{\alpha\beta}\chi'/2) = b/\sigma_{\alpha\beta}.$$

В роботі [29] наближено розраховано χ^* :

$$\cos({}^{\alpha\beta}\chi^*) = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{Z_\alpha Z_\beta e^2 \pi}{2kTby^2} \right)^2.$$

Це дозволяє записати в аналітичному вигляді усі Ω -інтеграли, що виникають при знаходженні коефіцієнтів A_n^α (додаток А.), B_n^α (додаток В.) та E_n^α :

$$\begin{aligned}\alpha\beta\Omega_{hs}^{(1,1)} &= \pi\sigma_{\alpha\beta}^2, \\ \alpha\beta\Omega_{hs}^{(1,2)} &= 3\alpha\beta\Omega_{hs}^{(1,1)}, \\ \alpha\beta\Omega_{hs}^{(1,3)} &= 12\alpha\beta\Omega_{hs}^{(1,1)}, \\ \alpha\beta\Omega_{hs}^{(2,2)} &= 2\alpha\beta\Omega_{hs}^{(1,1)},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\alpha\beta\Omega_l^{(1,1)} &= \frac{\pi^3}{2} \left(\frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{2kT} \right)^2 \ln \frac{D}{\sigma_{\alpha\beta}}, \\ \alpha\beta\Omega_l^{(1,2)} &= 2\alpha\beta\Omega_l^{(1,1)}, \\ \alpha\beta\Omega_l^{(1,3)} &= 12\alpha\beta\Omega_l^{(1,1)}, \\ \alpha\beta\Omega_l^{(2,2)} &= 4\alpha\beta\Omega_l^{(1,1)}.\end{aligned}$$

При обчисленні $\alpha\beta\Omega_l^{(r,p)}$ введено нову величину: D – радіус обрізання верхньої межі інтегралу по b . Це необхідно для того, щоб уникнути логарифмічної розбіжності інтегралу на великих відстанях. Величина D має розмірність довжини і зміст радіусу екранування (радіусу Дебая). Рівняння для знаходження D є окремою задачею і в цій роботі вона не розв'язується.

D. Чисельні розрахунки $D^{\alpha\beta}$, D_T^α , κ , η бінарних сумішей

Δ	T , K	η , Па·с, MD	η , Па·с, EDHST	η , Па·с	D^{Ar-Kr} , $\frac{m^2}{c}$, MD	D^{Ar-Kr} , $\frac{m^2}{c}$
0.1	508	$6.47 \cdot 10^{-5}$ **		$2.58 \cdot 10^{-5}$		
0.1	1196	$7.72 \cdot 10^{-5}$ *	$8.56 \cdot 10^{-5}$ ***	$3.95 \cdot 10^{-5}$	$1.518 \cdot 10^{-7}$ **	$2.568 \cdot 10^{-7}$

Таблиця 1. Порівняння теоретичних розрахунків коефіцієнтів сумарної зсувної в'язкості η та взаємної дифузії $D^{\alpha\beta}$ з результатами молекулярної динаміки та інших теорій для ланард-дженсонівських рідин з аргону та криптону. * – дані взято з роботи [33], ** – дані взято з роботи [34], *** – дані взято з роботи [35].

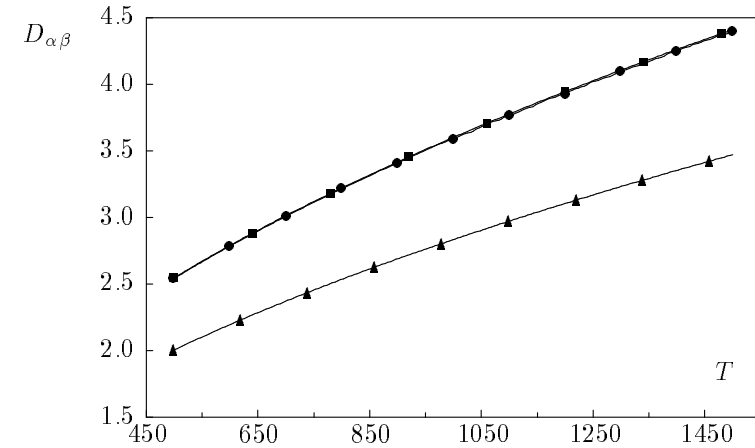


Рис. 1: Коефіцієнти взаємної дифузії нейтральних сумішей Ar-Kr (\bullet), Ar-Xe (\blacksquare), Kr-Xe (\blacktriangle) у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. $D_{\alpha\beta}$: 10^{-7} [m^2/c], T : [K]. Співвідношення густин легшої компоненти до важчої у суміші 1:1.

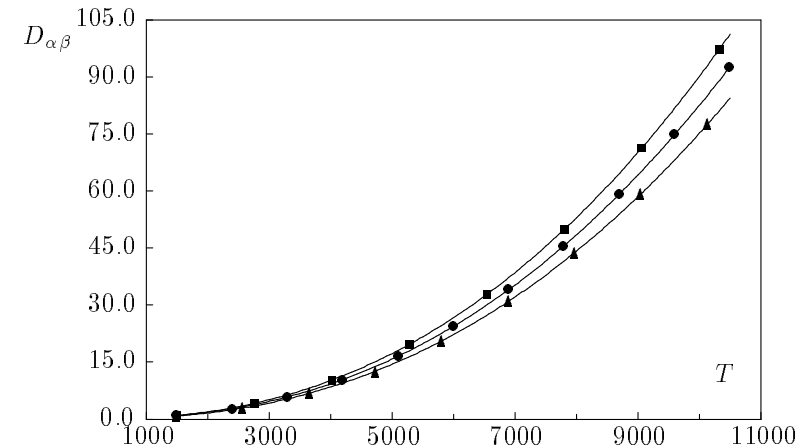


Рис. 2: Коефіцієнти взаємної дифузії однократно іонізованих сумішей Ar-Kr (\bullet), Ar-Xe (\blacksquare), Kr-Xe (\blacktriangle) у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. $D_{\alpha\beta}$: 10^{-9} [m^2/c], T : [K]. Співвідношення густин легшої компоненти до важчої у суміші 1:1.

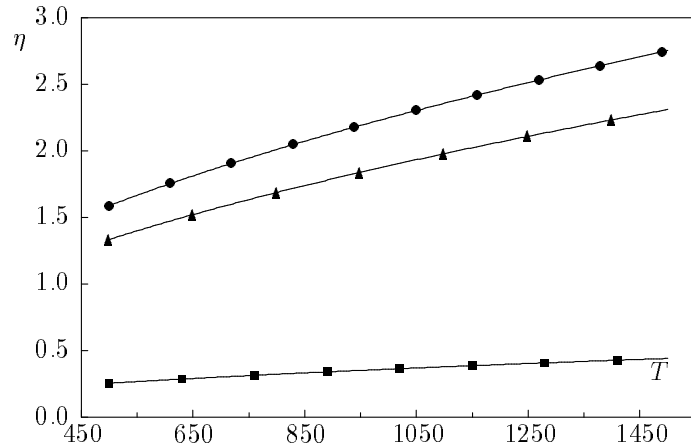


Рис. 3: Коефіцієнти зсувної в'язкості нейтральної суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. $\eta: 10^{-4}$ [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

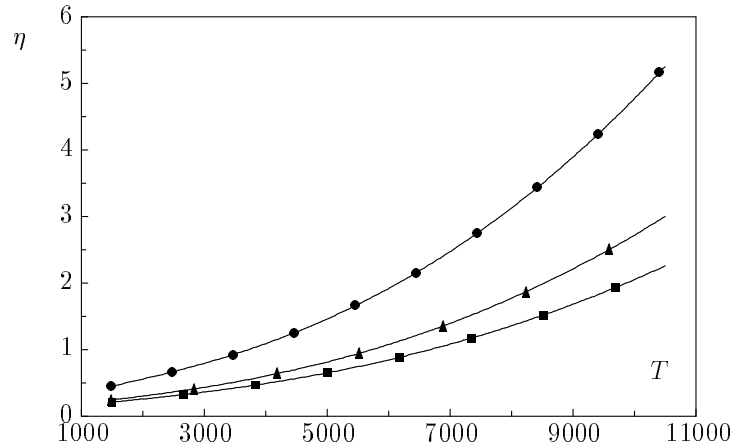


Рис. 4: Коефіцієнти зсувної в'язкості однократно іонізованої суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. $\eta: 10^{-6}$ [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

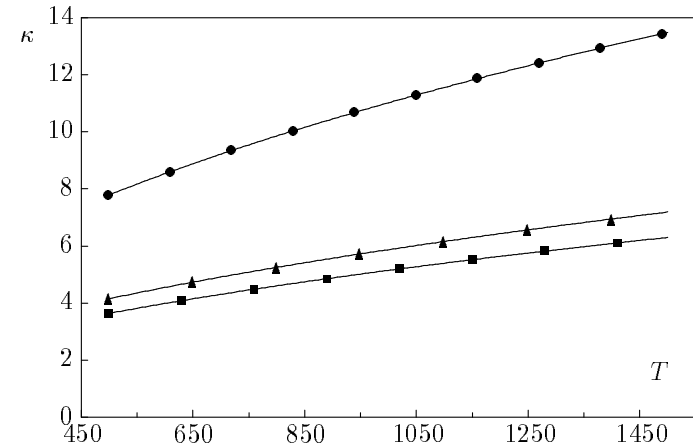


Рис. 5: Коефіцієнти об'ємної в'язкості нейтральної суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. $\kappa: 10^{-6}$ [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

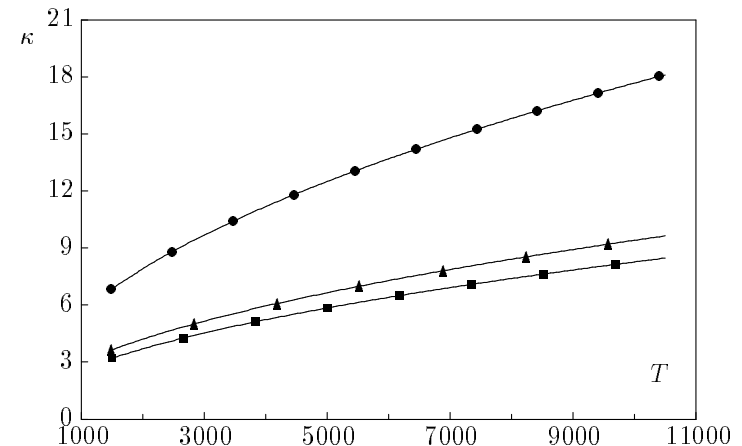


Рис. 6: Коефіцієнти об'ємної в'язкості однократно іонізованої суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. $\kappa: 10^{-7}$ [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

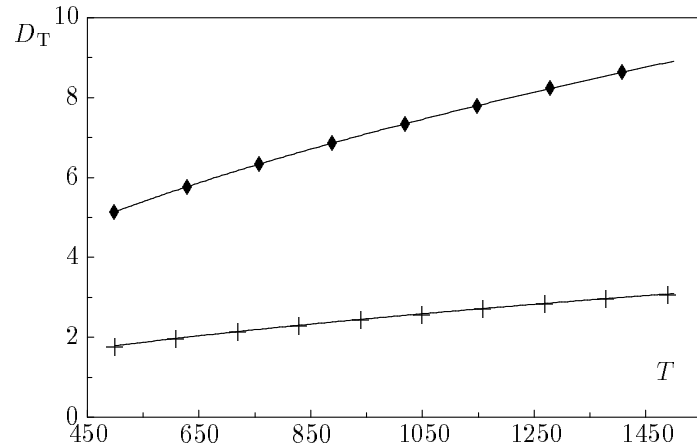


Рис. 7: Коефіцієнти термодифузії нейтральної суміші Ag-Kr: аргонної Ag (+) та криптової Kr (♦) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. D_T : 10^{-5} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

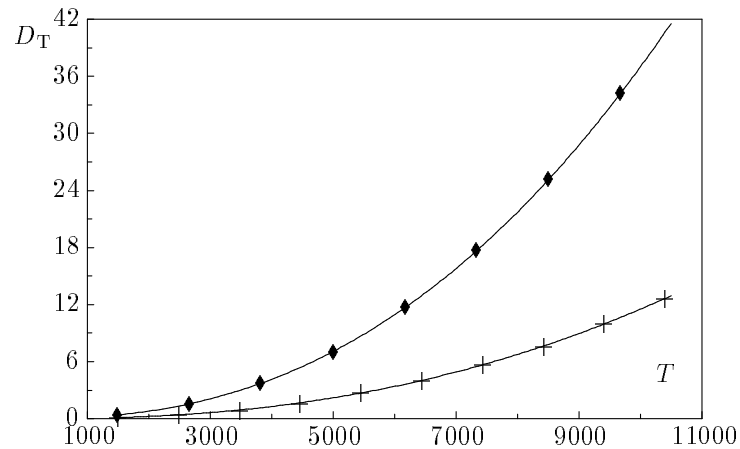


Рис. 8: Коефіцієнти термодифузії однократно іонізованої суміші Ag-Kr: аргонної Ag (+) та криптової Kr (♦) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. D_T : 10^{-8} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

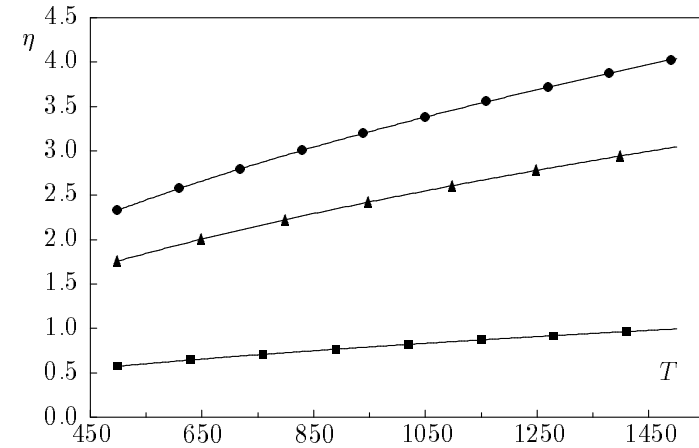


Рис. 9: Коефіцієнти зсувної в'язкості нейтральної суміші Ag-Xe (●), а також її аргонної Ag (■) та ксенонової Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. η : 10^{-4} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

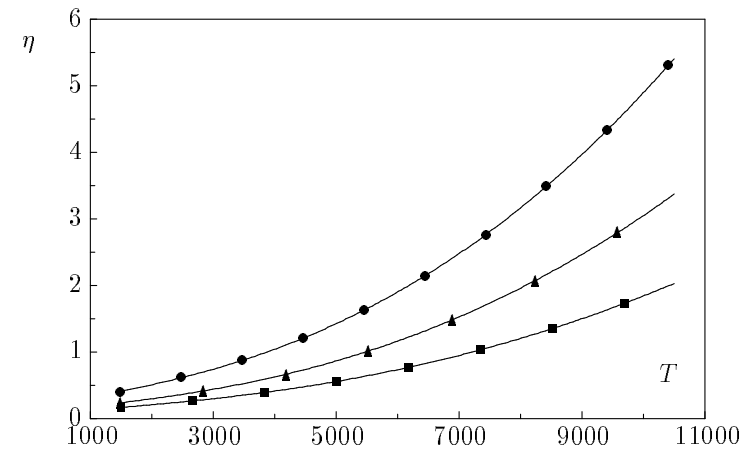


Рис. 10: Коефіцієнти зсувної в'язкості однократно іонізованої суміші Ag-Xe (●), а також її аргонної Ag (■) та ксенонової Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. η : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

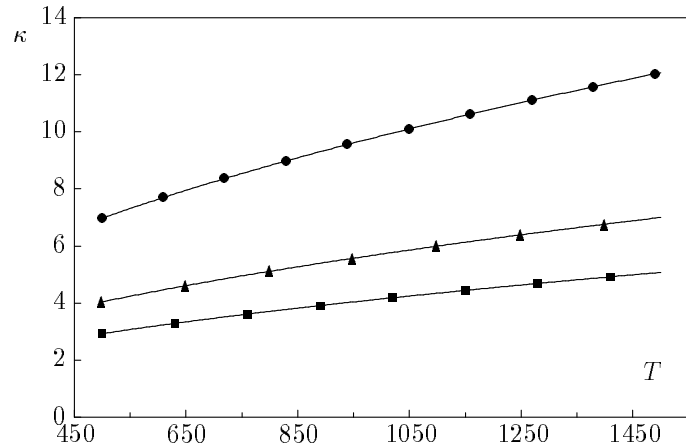


Рис. 11: Коефіцієнти об'ємної в'язкості нейтральної суміші Ar-He (●), а також її аргонної Ar (■) та ксенонної Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. κ : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

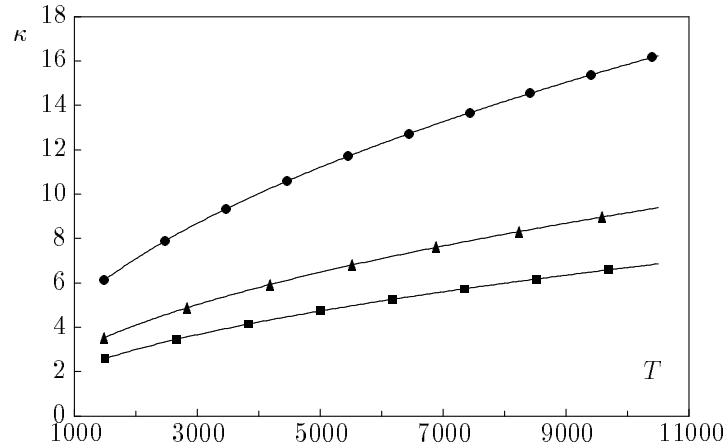


Рис. 12: Коефіцієнти об'ємної в'язкості однократно іонізованої суміші Ar-He (●), а також її аргонної Ar (■) та ксенонної Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. κ : 10^{-7} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

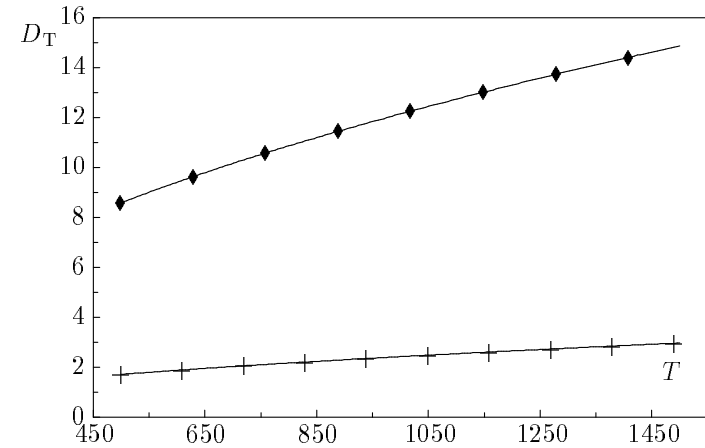


Рис. 13: Коефіцієнти термодифузії нейтральної суміші Ar-He: аргонної Ar (+) та ксенонної Xe (◆) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. D_T : 10^{-5} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

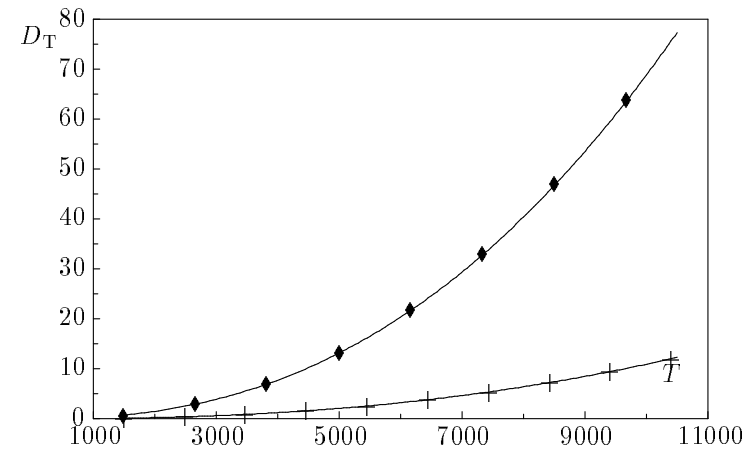


Рис. 14: Коефіцієнти термодифузії однократно іонізованої суміші Ar-He: аргонної Ar (+) та ксенонної Xe (◆) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. D_T : 10^{-8} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

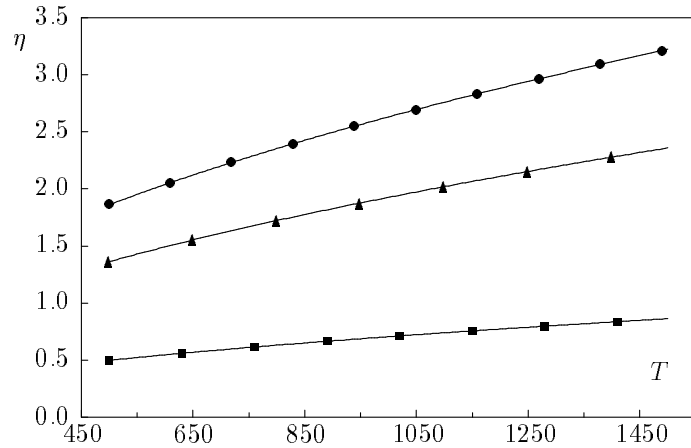


Рис. 15: Коефіцієнти зсувної в'язкості нейтральної суміші Kr-Xe (\bullet), а також її криптонової Kr (\blacksquare) та ксенонової Xe (\blacktriangle) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. η : 10^{-4} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

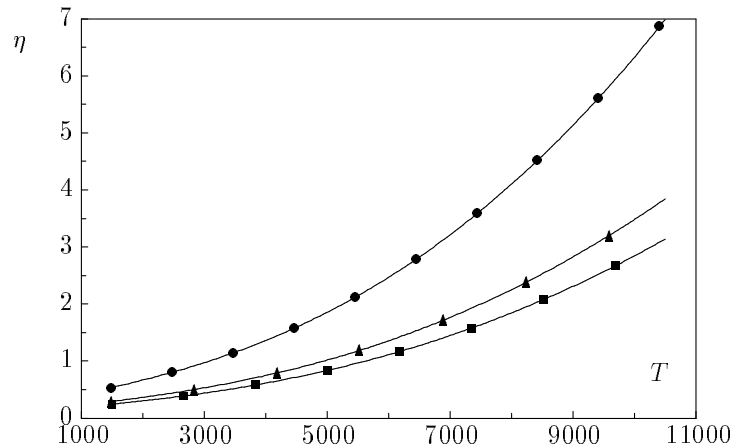


Рис. 16: Коефіцієнти зсувної в'язкості однократно іонізованої суміші Kr-Xe (\bullet), а також її криптонової Kr (\blacksquare) та ксенонової Xe (\blacktriangle) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. η : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

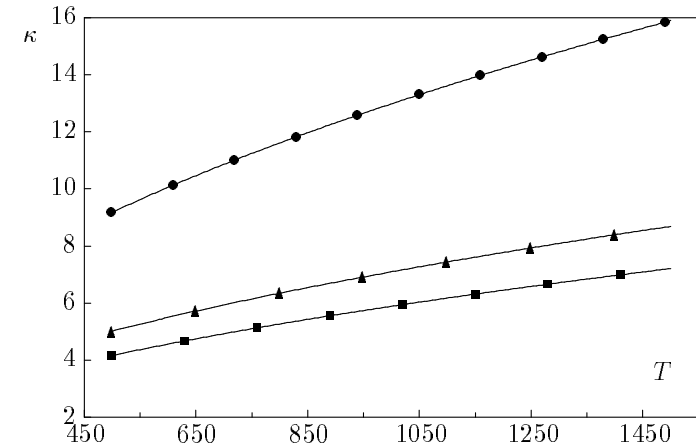


Рис. 17: Коефіцієнти об'ємної в'язкості нейтральної суміші Kr-Xe (\bullet), а також її криптонової Kr (\blacksquare) та ксенонової Xe (\blacktriangle) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. κ : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

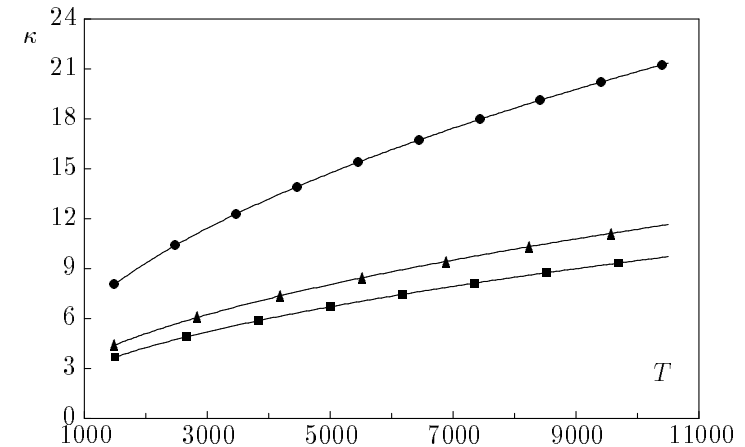


Рис. 18: Коефіцієнти об'ємної в'язкості однократно іонізованої суміші Kr-Xe (\bullet), а також її криптонової Kr (\blacksquare) та ксенонової Xe (\blacktriangle) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. κ : 10^{-7} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

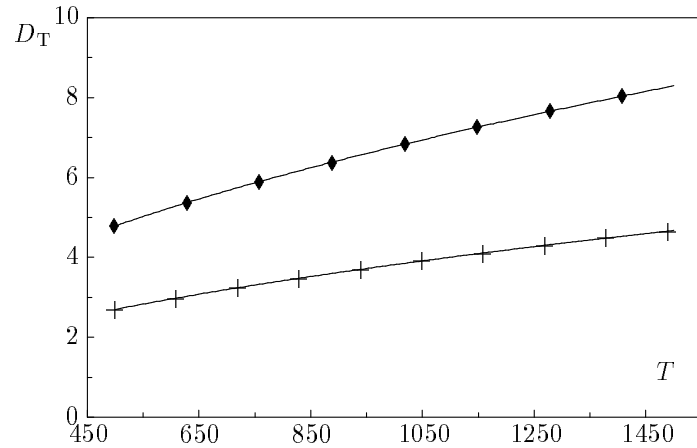


Рис. 19: Коефіцієнти термодифузії нейтральної суміші Kr-Xe: криптової Kr (+) та ксенової Xe (♦) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. D_T : 10^{-5} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

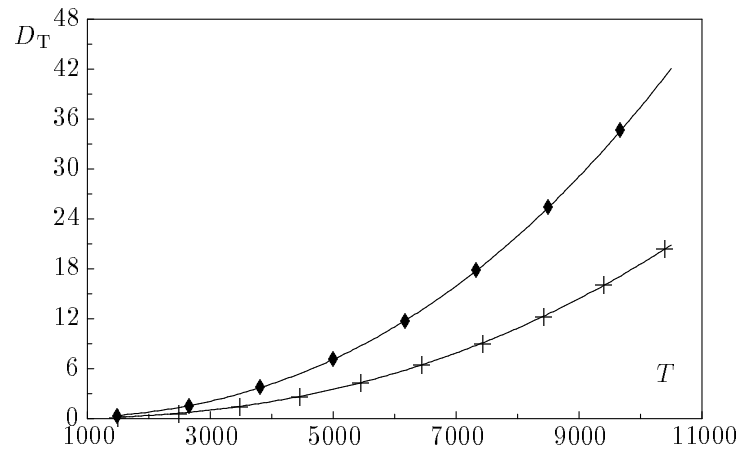


Рис. 20: Коефіцієнти термодифузії однократно іонізованої суміші Kr-Xe: криптової Kr (+) та ксенової Xe (♦) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. D_T : 10^{-8} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:1.

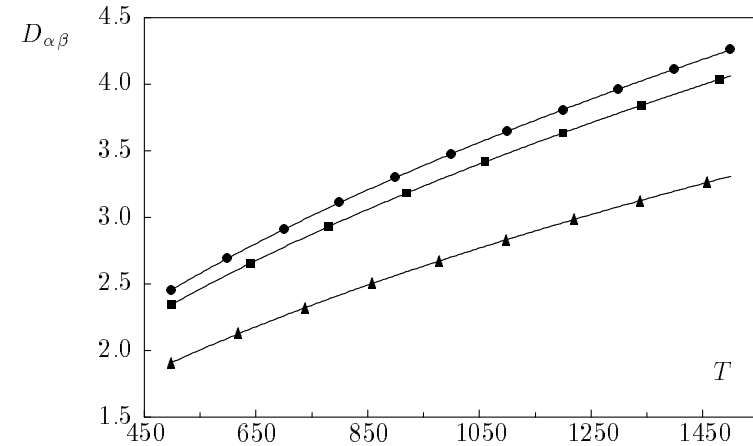


Рис. 21: Коефіцієнти взаємної дифузії нейтральних сумішей Ar-Kr (♦), Ar-Xe (■), Kr-Xe (▲) у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. $D_{\alpha\beta}$: 10^{-7} [м²/с], T : [K]. Співвідношення густин легшої компоненти до важчої у суміші 2:1.

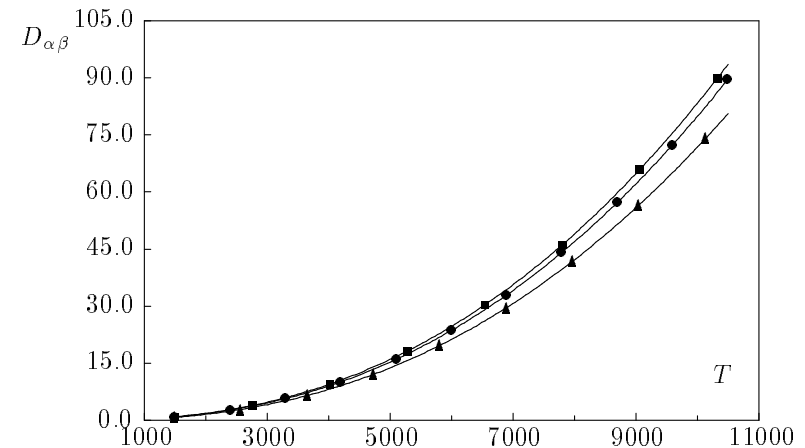


Рис. 22: Коефіцієнти взаємної дифузії однократно іонізованих сумішей Ar-Kr (♦), Ar-Xe (■), Kr-Xe (▲) у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. $D_{\alpha\beta}$: 10^{-9} [м²/с], T : [K]. Співвідношення густин легшої компоненти до важчої у суміші 2:1.

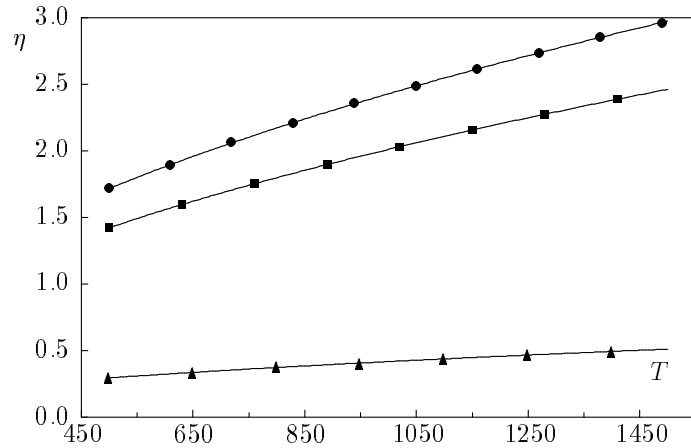


Рис. 23: Коефіцієнти зсувної в'язкості нейтральної суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. η : 10^{-4} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

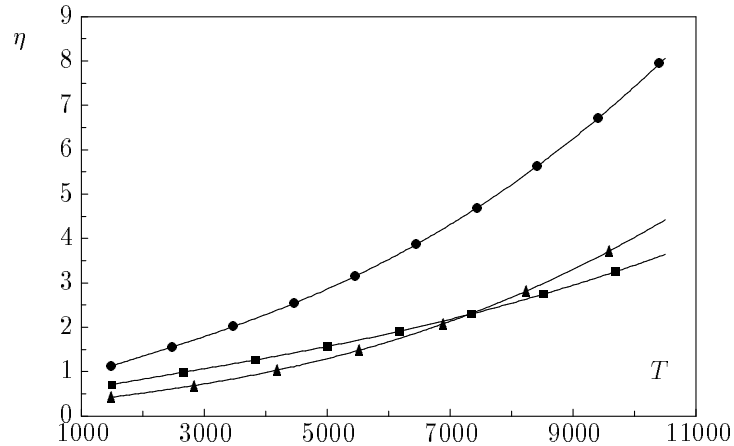


Рис. 24: Коефіцієнти зсувної в'язкості однократно іонізованої суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. η : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

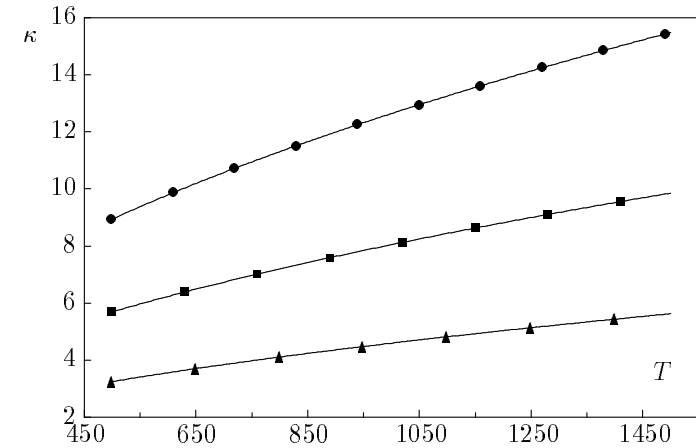


Рис. 25: Коефіцієнти об'ємної в'язкості нейтральної суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. κ : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

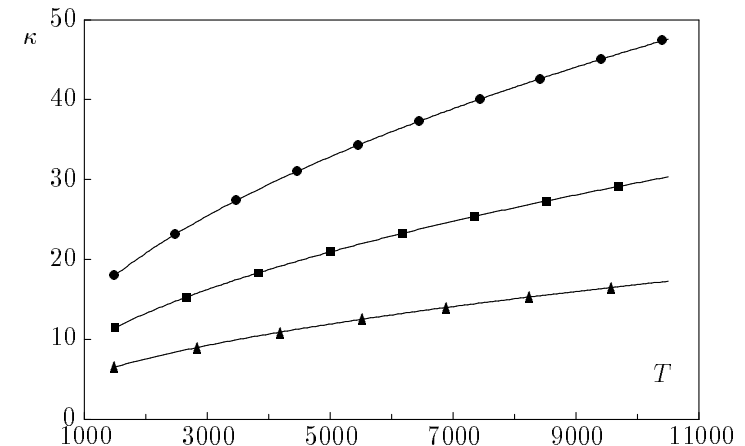


Рис. 26: Коефіцієнти об'ємної в'язкості однократно іонізованої суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. κ : 10^{-7} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

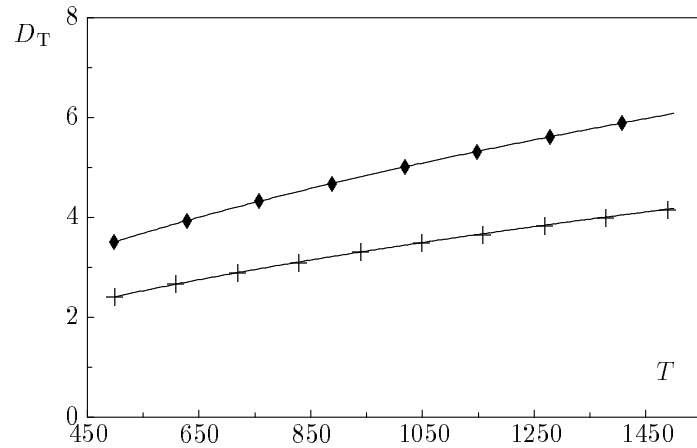


Рис. 27: Коефіцієнти термодифузії нейтральної суміші Ar-Kr: аргонної Ar (+) та криптової Kr (♦) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. D_T : 10^{-5} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

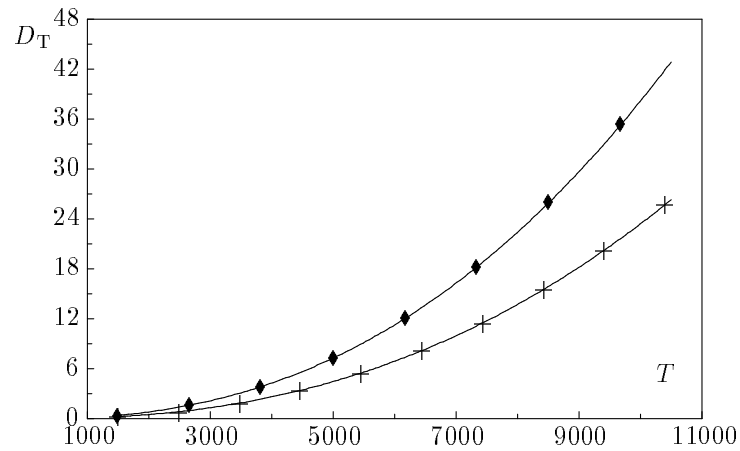


Рис. 28: Коефіцієнти термодифузії однократно іонізованої суміші Ar-Kr: аргонної Ar (+) та криптової Kr (♦) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. D_T : 10^{-8} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

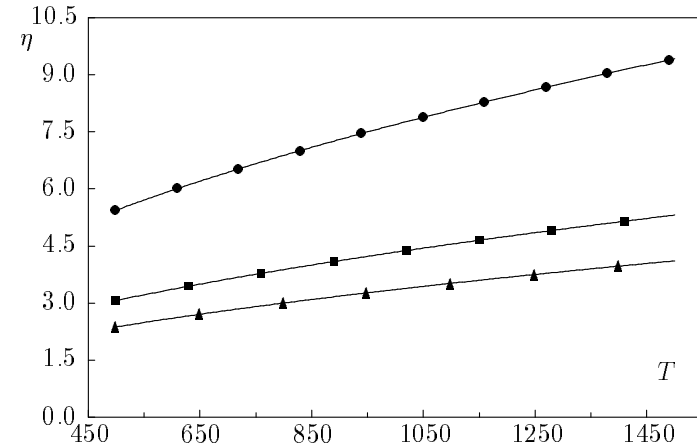


Рис. 29: Коефіцієнти зсувної в'язкості нейтральної суміші Ar-He (•), а також її аргонної Ar (■) та ксенонної Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. η : 10^{-4} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

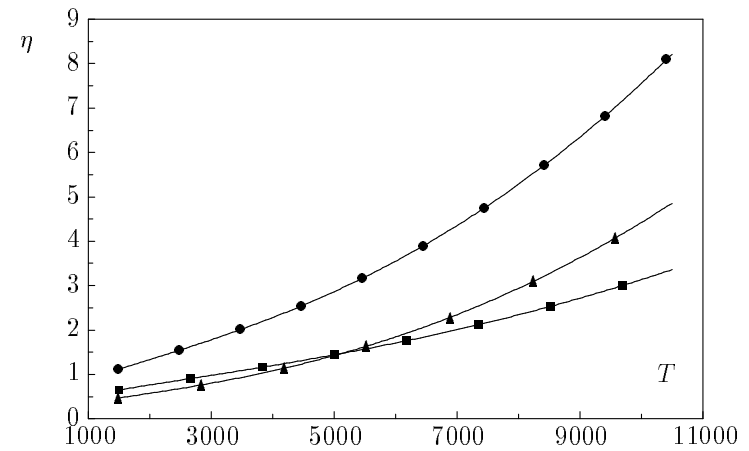


Рис. 30: Коефіцієнти зсувної в'язкості однократно іонізованої суміші Ar-He (•), а також її аргонної Ar (■) та ксенонної Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. η : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

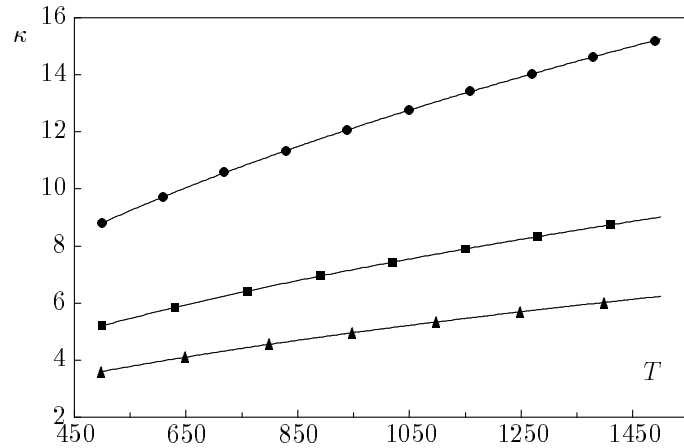


Рис. 31: Коефіцієнти об'ємної в'язкості нейтральної суміші Ar-He (●), а також її аргонної Ar (■) та ксенонної Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. κ : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

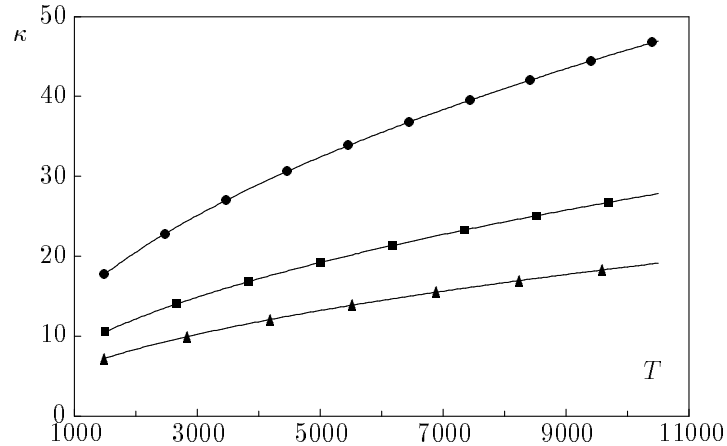


Рис. 32: Коефіцієнти об'ємної в'язкості однократно іонізованої суміші Ar-He (●), а також її аргонної Ar (■) та ксенонної Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. κ : 10^{-7} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

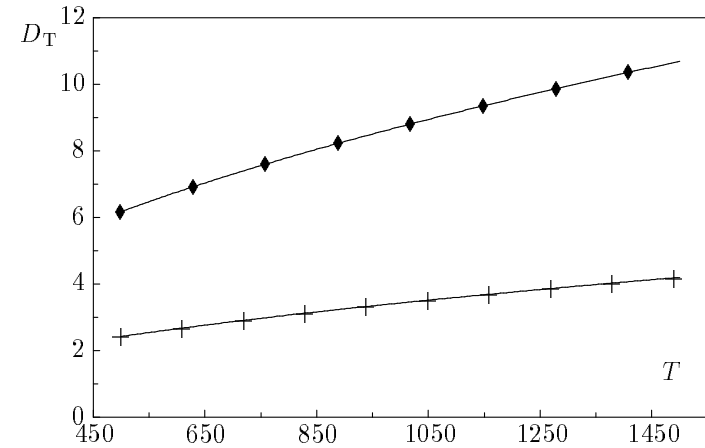


Рис. 33: Коефіцієнти термодифузії нейтральної суміші Ar-He: аргонної Ar (+) та ксенонної Xe (◆) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. D_T : 10^{-5} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

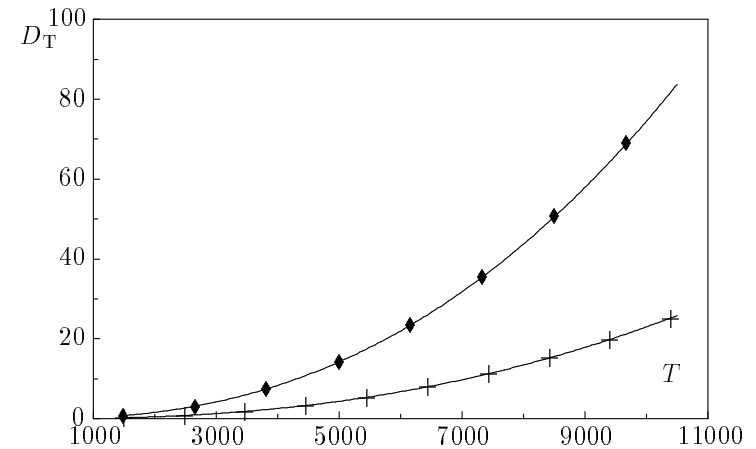


Рис. 34: Коефіцієнти термодифузії однократно іонізованої суміші Ar-He: аргонної Ar (+) та ксенонної Xe (◆) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. D_T : 10^{-8} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

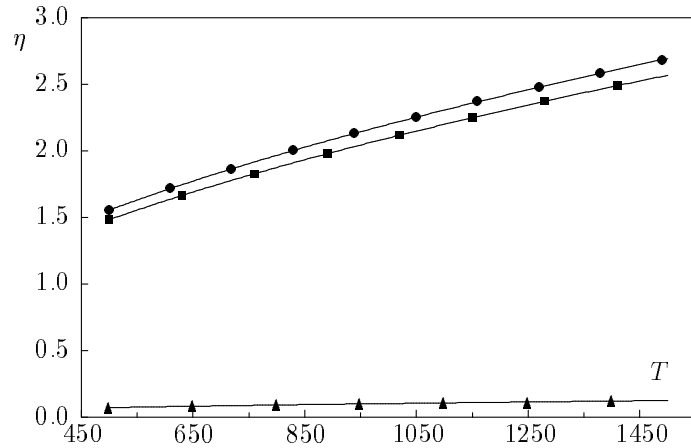


Рис. 35: Коефіцієнти зсувної в'язкості нейтральної суміші Kr-Xe (●), а також її криптонової Kr (■) та ксенонової Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. η : 10^{-4} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

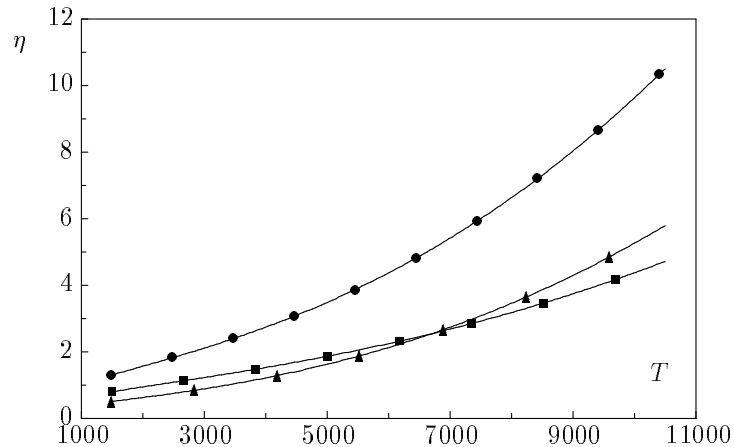


Рис. 36: Коефіцієнти зсувної в'язкості однократно іонізованої суміші Kr-Xe (●), а також її криптонової Kr (■) та ксенонової Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. η : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

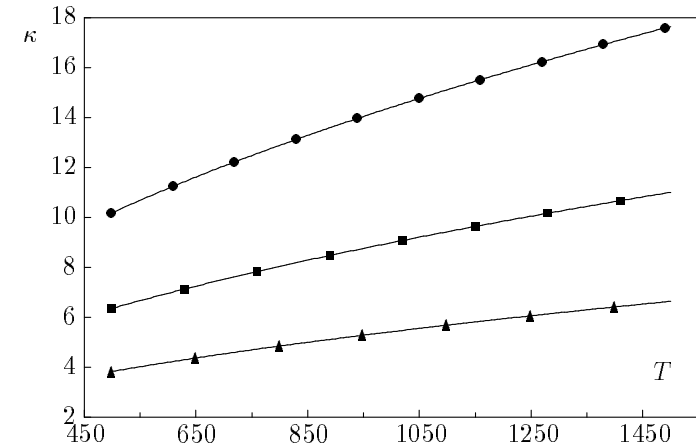


Рис. 37: Коефіцієнти об'ємної в'язкості нейтральної суміші Kr-Xe (●), а також її криптонової Kr (■) та ксенонової Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. κ : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

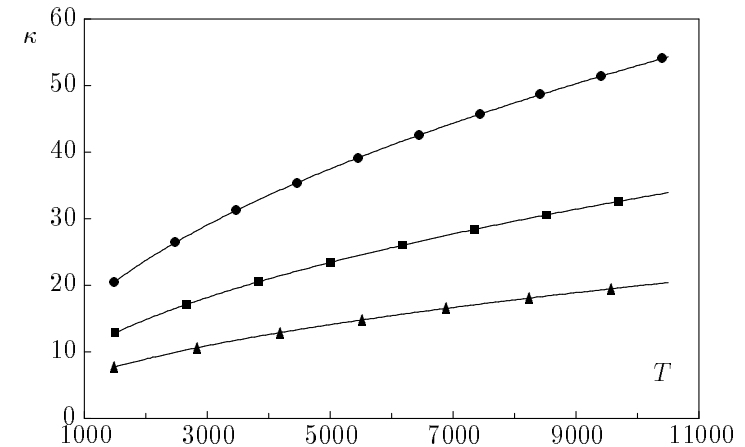


Рис. 38: Коефіцієнти об'ємної в'язкості однократно іонізованої суміші Kr-Xe (●), а також її криптонової Kr (■) та ксенонової Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. κ : 10^{-7} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

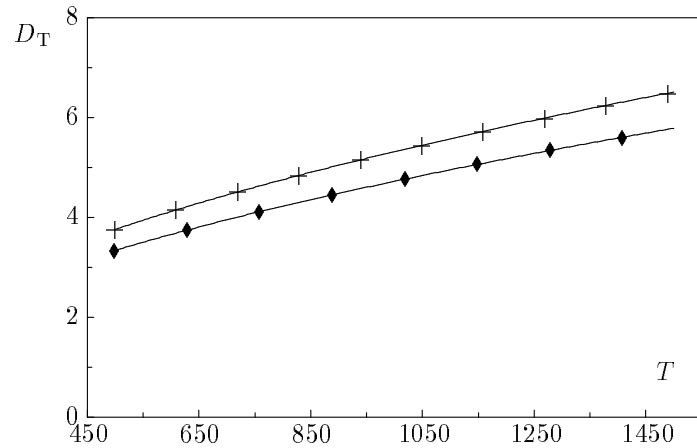


Рис. 39: Коефіцієнти термодифузії нейтральної суміші Kr-Xe: криптової Kr (+) та ксенової Xe (♦) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. D_T : 10^{-5} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

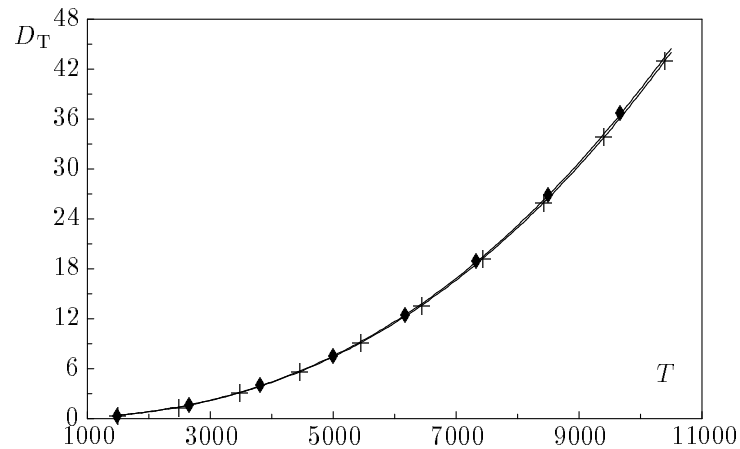


Рис. 40: Коефіцієнти термодифузії однократно іонізованої суміші Kr-Xe: криптової Kr (+) та ксенової Xe (♦) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. D_T : 10^{-8} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 2:1.

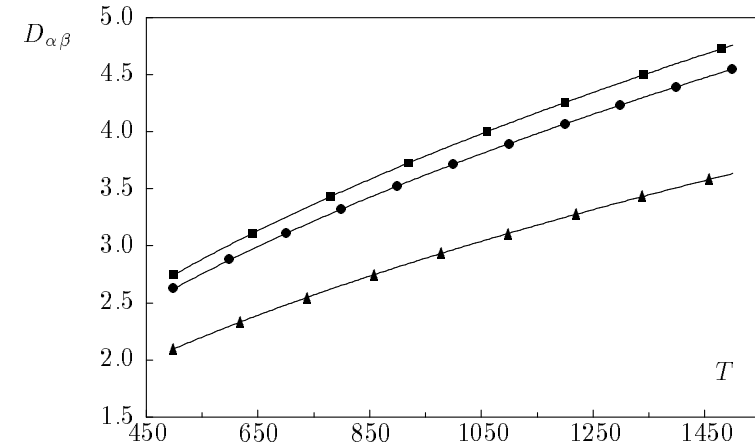


Рис. 41: Коефіцієнти взаємної дифузії нейтральних сумішей Ar-Kr (●), Ar-Xe (■), Kr-Xe (▲) у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. $D_{\alpha\beta}$: 10^{-7} [м²/с], T : [K]. Співвідношення густин легшої компоненти до важчої у суміші 1:2.

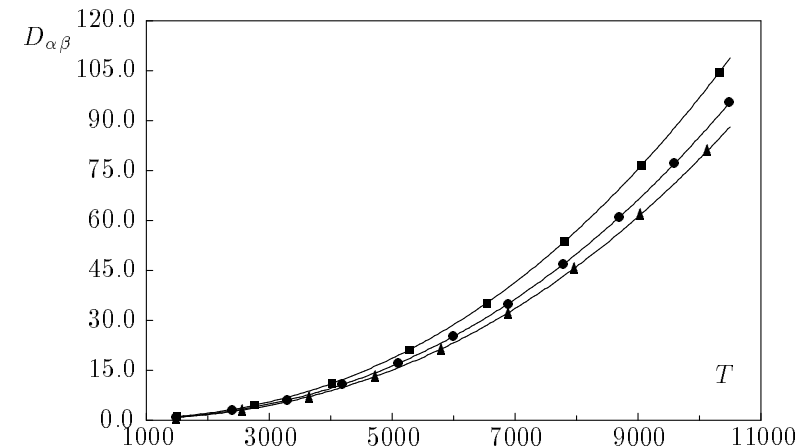


Рис. 42: Коефіцієнти взаємної дифузії однократно іонізованих сумішей Ar-Kr (●), Ar-Xe (■), Kr-Xe (▲) у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. $D_{\alpha\beta}$: 10^{-9} [м²/с], T : [K]. Співвідношення густин легшої компоненти до важчої у суміші 1:2.

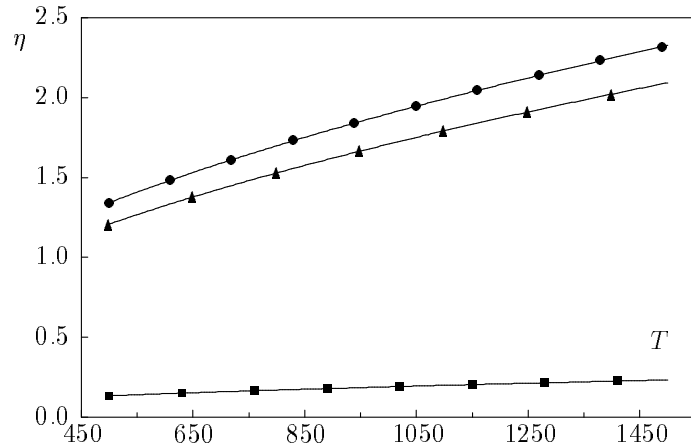


Рис. 43: Коефіцієнти зсувної в'язкості нейтральної суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. $\eta: 10^{-4}$ [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

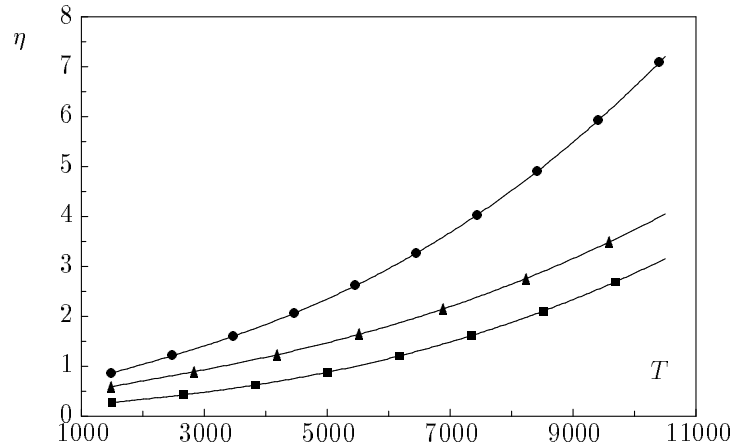


Рис. 44: Коефіцієнти зсувної в'язкості однократно іонізованої суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. $\eta: 10^{-6}$ [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

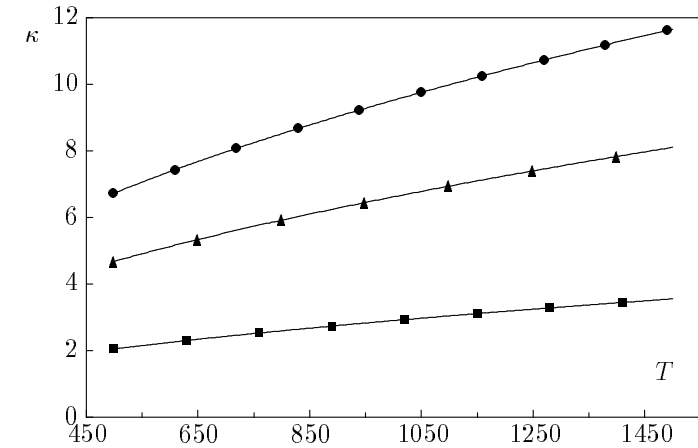


Рис. 45: Коефіцієнти об'ємної в'язкості нейтральної суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. $\kappa: 10^{-6}$ [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

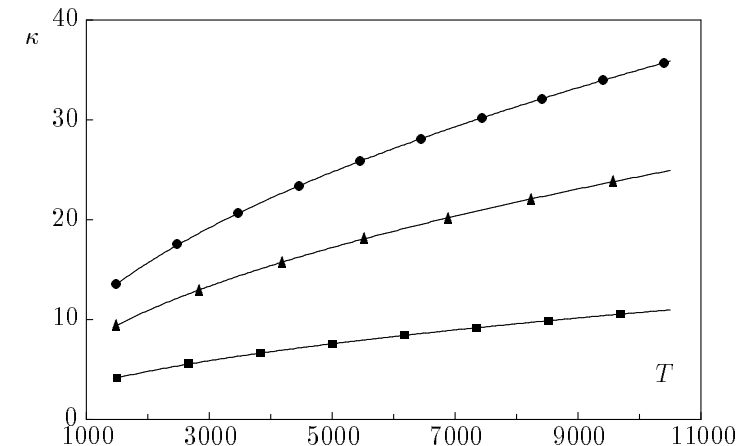


Рис. 46: Коефіцієнти об'ємної в'язкості однократно іонізованої суміші Ar-Kr (●), а також її аргонної Ar (■) та криптонової Kr (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. $\kappa: 10^{-7}$ [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

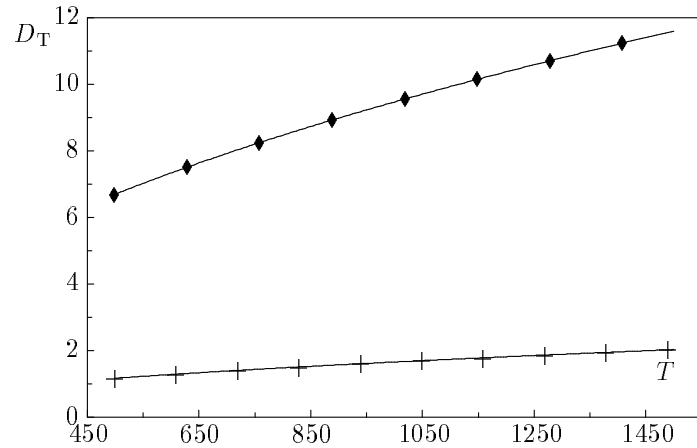


Рис. 47: Коефіцієнти термодифузії нейтральної суміші Аг-Кг: аргонної Аг (+) та криптової Кг (♦) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. D_T : 10^{-5} [кг/м·с], T : [К]. Співвідношення густин 1:2.

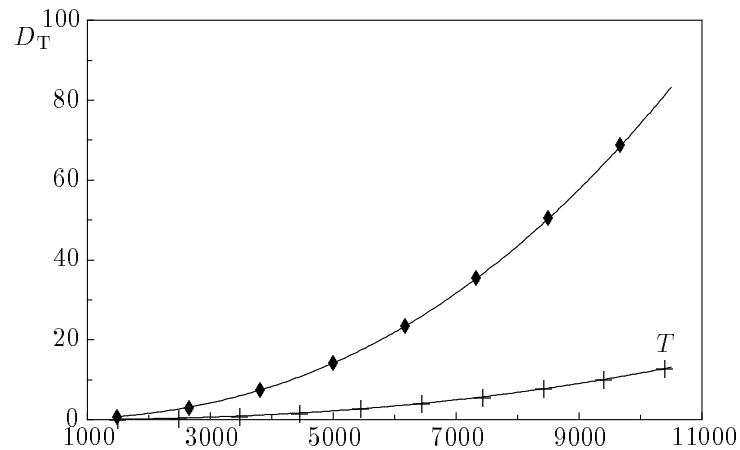


Рис. 48: Коефіцієнти термодифузії однократно іонізованої суміші Аг-Кг: аргонної Аг (+) та криптової Кг (♦) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. D_T : 10^{-8} [кг/м·с], T : [К]. Співвідношення густин 1:2.

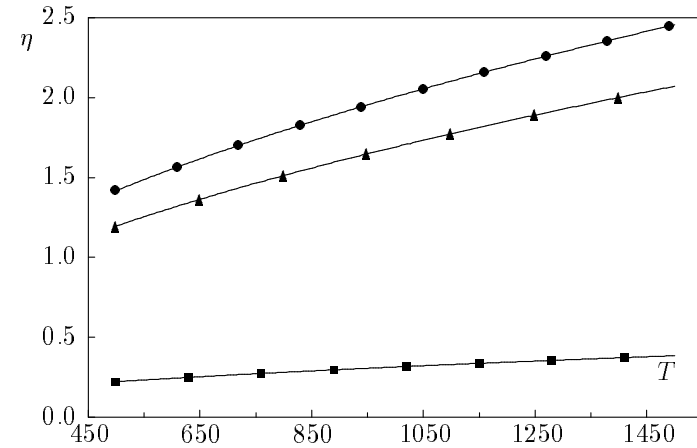


Рис. 49: Коефіцієнти зсувної в'язкості нейтральної суміші Аг-Хе (♦), а також її аргонної Аг (■) та ксенонної Хе (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. η : 10^{-4} [Па·с], T : [К]. Співвідношення густин 1:2.

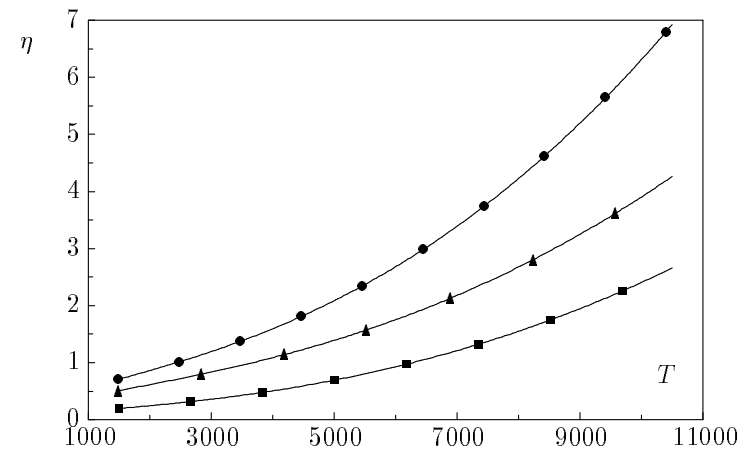


Рис. 50: Коефіцієнти зсувної в'язкості однократно іонізованої суміші Аг-Хе (♦), а також її аргонної Аг (■) та ксенонної Хе (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. η : 10^{-6} [Па·с], T : [К]. Співвідношення густин 1:2.

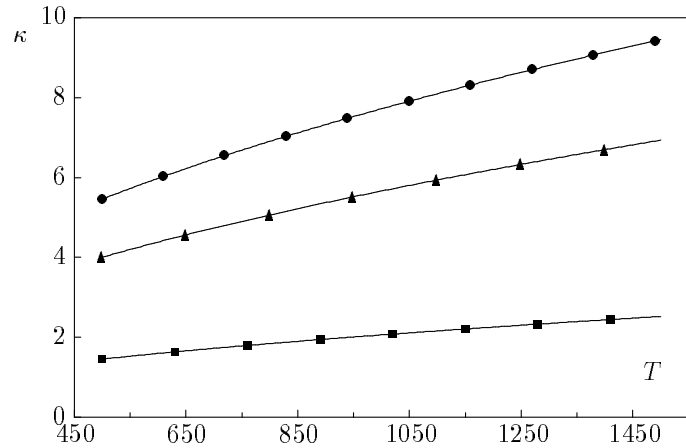


Рис. 51: Коефіцієнти об'ємної в'язкості нейтральної суміші Ag-He (●), а також її аргонної Ar (■) та ксенонної Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. κ : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

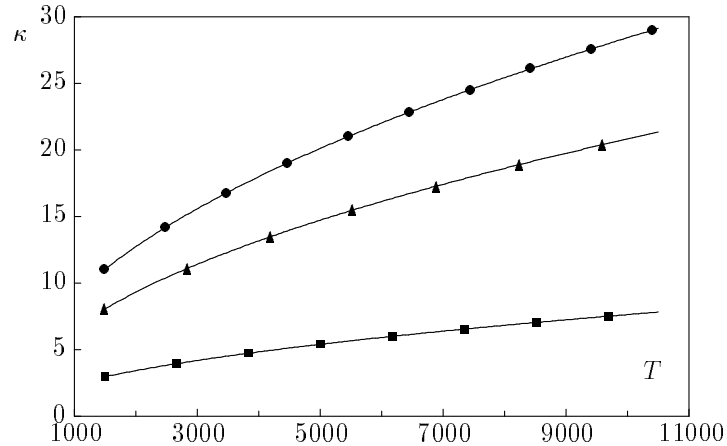


Рис. 52: Коефіцієнти об'ємної в'язкості однократно іонізованої суміші Ag-He (●), а також її аргонної Ar (■) та ксенонної Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. κ : 10^{-7} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

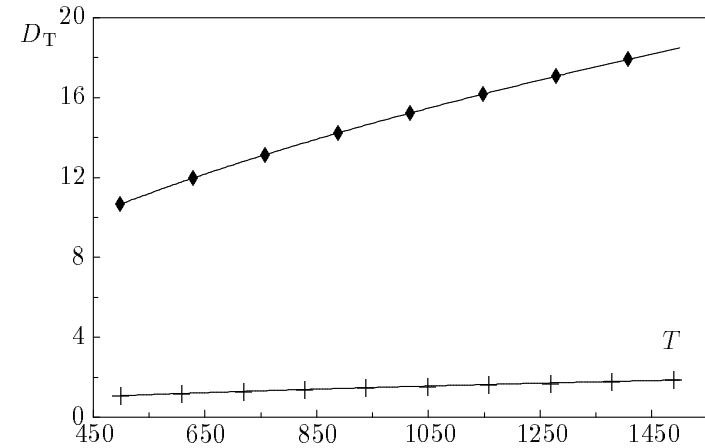


Рис. 53: Коефіцієнти термодифузії нейтральної суміші Ag-He: аргонної Ar (+) та ксенонної Xe (◆) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. D_T : 10^{-5} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

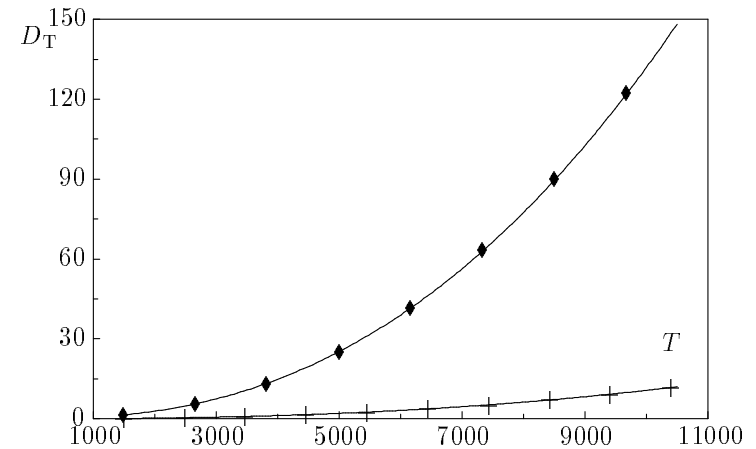


Рис. 54: Коефіцієнти термодифузії однократно іонізованої суміші Ag-He: аргонної Ar (+) та ксенонної Xe (◆) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. D_T : 10^{-8} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

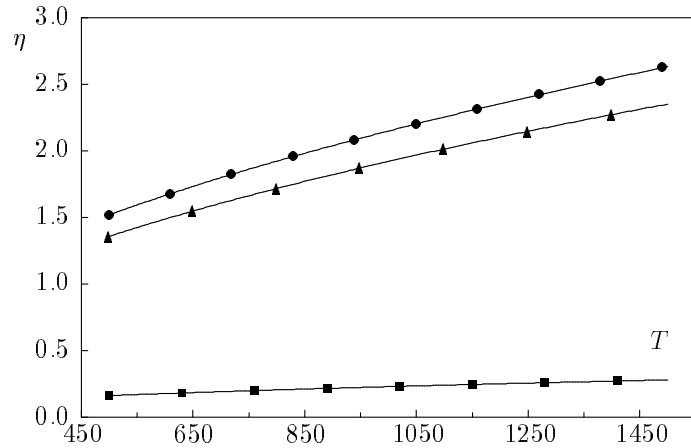


Рис. 55: Коефіцієнти зсувної в'язкості нейтральної суміші Kr-Xe (●), а також її криптонової Kr (■) та ксенонової Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. η : 10^{-4} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

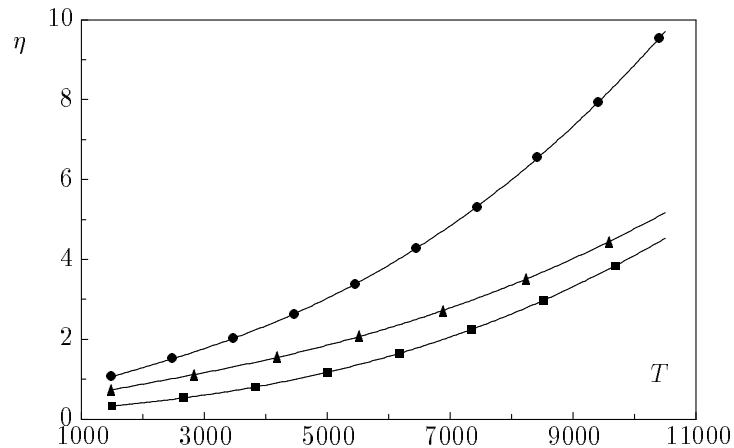


Рис. 56: Коефіцієнти зсувної в'язкості однократно іонізованої суміші Kr-Xe (●), а також її криптонової Kr (■) та ксенонової Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. η : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

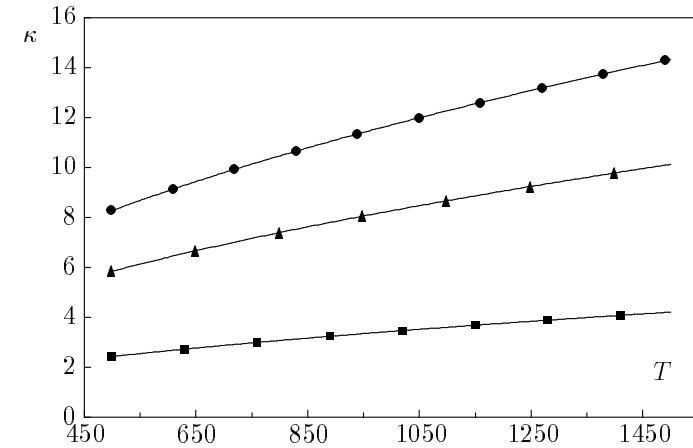


Рис. 57: Коефіцієнти об'ємної в'язкості нейтральної суміші Kr-Xe (●), а також її криптонової Kr (■) та ксенонової Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. κ : 10^{-6} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

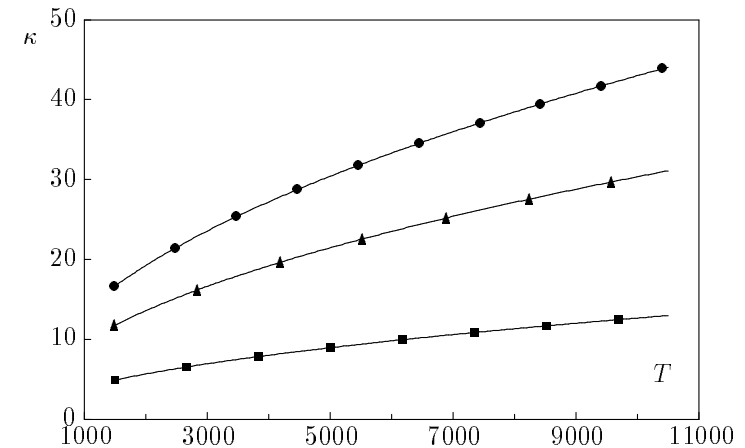


Рис. 58: Коефіцієнти об'ємної в'язкості однократно іонізованої суміші Kr-Xe (●), а також її криптонової Kr (■) та ксенонової Xe (▲) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. κ : 10^{-7} [Па·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

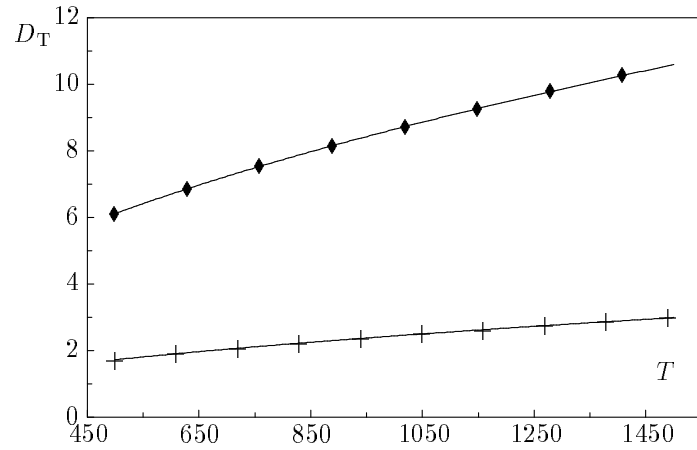


Рис. 59: Коефіцієнти термодифузії нейтральної суміші Kr-Xe: криптової Kr (+) та ксенової Xe (◆) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.1$. D_T : 10^{-5} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

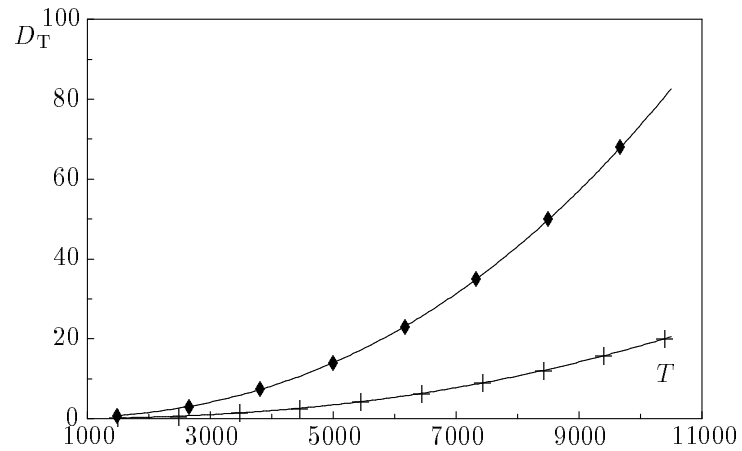


Рис. 60: Коефіцієнти термодифузії однократно іонізованої суміші Kr-Xe: криптової Kr (+) та ксенової Xe (◆) компонент у залежності від температури при $\Delta = 0.0125$. D_T : 10^{-8} [кг/м·с], T : [K]. Співвідношення густин 1:2.

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/>)

Олександр Євгенійович Кобрин
Ігор Петрович Омелян
Михайло Васильович Токарчук

НОРМАЛЬНИЙ РОЗВ'ЯЗОК КІНЕТИЧНОГО РІВНЯННЯ
ЕНСКОГА-ЛАНДАУ ДЛЯ ДВОКОМПОНЕНТНОЇ СИСТЕМИ
ЗАРЯДЖЕНИХ ТВЕРДИХ СФЕР МЕТОДОМ ЧЕПМЕНА-ЕНСКОГА.
ЧИСЕЛЬНИЙ РОЗРАХУНОК КОЕФІЦІЄНТІВ ПЕРЕНОСУ ДЛЯ СУМІШЕЙ
Ag-Kr, Ag-Xe, Kr-Xe

Роботу отримано 11 жовтня 1996р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділом теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені