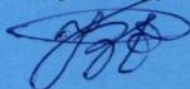


НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису



ІГНАТЮК Василь Васильович

**ДОСЛІДЖЕННЯ НЕЛІНІЙНИХ ФЛУКТУАЦІЙ
У ПРОСТИХ ТА ІОННИХ РІДИНАХ ПРИ
УЗГОДЖЕНОМУ ОПИСІ КІНЕТИКИ ТА
ГІДРОДИНАМІКИ**

01.04.14 — теплофізика і молекулярна фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ — 1997

538
539.19

AB 36,915

Дисертацією є рукопис

ЛНБ України ім.В.Стефаника

Робота виконана при Інституті фізики
Національної академії наук України



00761101 (G)

Науковий керівник — доктор фізико-математичних наук
М.В.Токарчук

Офіційні опоненти — доктор фізико-математичних наук
проф. З.О.Гурський

— доктор фізико-математичних наук
проф. А.Г.Загородній

Провідна організація — Національний науковий центр
"Харківський фізико-технічний
інститут"

Захист відбудеться "19" березня 1997 року о "15³⁰" годині на
засіданні спеціалізованої вченої ради Д 04.18.01 при Інституті
фізики конденсованих систем Національної академії наук Украї-
ни за адресою: 290011 м. Львів-11, вул. Свенціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інсти-
туту фізики конденсованих систем НАН України за адресою:
290026 м. Львів-26, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розіслано "14" лютого 1997 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради,
кандидат фіз.-мат. наук

Т.Є.Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Актуальність дослідження нелінійних флуктуацій в різноманітних системах (простих та іонних рідинах, розплавах металів та аморфних тілах) обумовлена тим, що поведінка будь-якої фізичної системи, особливо тієї, яка є далекою від стану рівноваги і густина або характерний параметр взаємодії якої не є малими, визначається не тільки лінійними процесами, а й цілим рядом явищ, нелінійних за своєю природою. Вказана задача крім суто теоретичної сторони має і важливий прикладний аспект, оскільки при використанні рідин в різноманітних технологічних процесах останні знаходяться в сильно нерівноважних станах, які характеризуються нелінійністю флуктуацій теплопереносу, переносу маси та заряду. Наявність останніх призводить до появи просторово-часової дисперсії коефіцієнтів переносу, що простежується в експериментах за розсіянням нейтронів, світла. В зв'язку з цим постає питання про дослідження узагальнених коефіцієнтів переносу (провідності, в'язкості, теплопровідності) при виникненні та дії нелінійних гідродинамічних флуктуацій густини маси, заряду, імпульсу та енергії в густих системах.

В загальному випадку на форму динамічного структурного фактора крім флуктуацій гідродинамічних змінних мають вплив флуктуації кінетичних змінних; в багатокомпонентних рідинах роль кінетичних колективних збуджень відіграють релаксаційні моди, пов'язані з міжсортною взаємодією частинок.

При розгляді нелінійних флуктуацій для розмикання незвідних частин кореляційних функцій, що визначають дисперсію відповідних коефіцієнтів переносу, використовують наближення взаємодіючих мод. На даний момент не існує однозначної відповіді, при яких значеннях хвильового вектора k (верхня межа) можна використовувати вказане наближення і які чинники впливають на структуру часових кореляційних функцій. В дисертаційній роботі, в якій проведено дослідження нелінійних флуктуацій на основі рівняння Фоккера - Планка для нерівноважної функції розподілу колективних змінних, дається відповідь на це запитання.

Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсо-

ваних систем Національної академії наук України згідно плану робіт по темі: шифр 1.4.8.10 №0194022991 “Розвиток і застосування статистичної теорії нерівноважних властивостей простих, полярних, магнітних рідин і плазми на основі узгодженого опису кінетики і гідродинаміки”.

Мета роботи. Отримання виразів для часових кореляційних функцій у випадку слабо та сильнонерівноважних систем з врахуванням дисперсії коефіцієнтів переносу, розрахованої на основі теорії взаємодіючих мод, при узгодженому описі кінетичних та гідродинамічних явищ. Чисельний розрахунок динамічного структурного фактора простої рідини з модельним потенціалом Леннарда - Джонса на основі врахування квадратичних флуктуацій динамічних змінних; розрахунок дисперсії частоти звуку.

Наукова новизна. В дисертаційній роботі вперше:

- отримано рівняння переносу та рівняння для часових кореляційних функцій густини числа частинок, імпульсу та енергії у випадку слабонерівноважної плазми у внутрішньому електромагнітному полі, в яких коефіцієнти переносу зазнають перенормування як за рахунок кінетики частинок плазми, так і за рахунок кінетики осциляторів поля;
- проведено аналіз спектру колективних збуджень слабонерівноважної плазми у внутрішньому електромагнітному полі в довгохвильовій границі з врахуванням міжсорткової взаємодії частинок;
- отримано вирази для функціоналу ентропії, термодинамічних сил та гідродинамічних швидкостей простих та іонних рідин у вищих порядках за флуктуаціями;
- отримано вирази для дисперсії коефіцієнтів переносу з врахуванням вищих флуктуацій динамічних змінних;
- проведено чисельний розрахунок динамічного структурного фактора простої рідини на основі теорії взаємодіючих мод у наближенні, квадратичному за флуктуаціями, при виході за рамки в'язкоеластичного наближення. Показано необхідність врахування співвідношень нелокальної термодинаміки. Виконано аналіз звукової моди та визначено коефіцієнт при $k^{5/2}$ у виразі для дисперсії звуку.

Практична і наукова цінність. Застосування формалізму осциляторів електромагнітного поля при узгодженому врахуванні кінетики останніх та кінетики частинок плазми дозволяє проводити опис процесів переносу та досліджувати динамічні властивості слабонерівноважної плазми (зокрема - динамічний структурний фактор) як у випадку лише внутрішніх полів, так і при наявності зовнішнього електромагнітного поля. Важливим фактором є те, що коефіцієнти переносу такої системи залежать від стану поля. Вибір за базисні змінні парціальних густин, а відтак - врахування міжсорткової взаємодії частинок приводить до появи крім чисто гідродинамічних колективних мод також релаксаційних, що може суттєвим чином впливати на структуру часових кореляційних функцій і приводить до появи нових пропагаторних збуджень, які при певних умовах простежуються в експерименті як "швидкий звук".

Наступним кроком є врахування нелінійних флуктуацій, що є особливо важливим у випадку густих систем. Врахування нелінійних флуктуацій дозволяє дослідити ряд низькочастотних аномалій в рідинах (як простих так і складних), таких як існування неекспоненційного загасання ("довгих хвостів") часових кореляційних функцій, просторово - часової дисперсії коефіцієнтів переносу, перенормування звукової частоти внаслідок флуктуацій густини маси, імпульсу та енергії системи. Всі зазначені явища дозволяють пряму експериментальну перевірку, зокрема - в експериментах з розсіяння нейтронів або світла, що є особливо важливим для аналізу структурних властивостей рідин, які перебувають в сильнонерівноважних станах, і може знайти своє застосування при дослідженні фазових переходів (як рівноважних так і динамічних типу склування).

Для адекватного опису дисперсії коефіцієнтів переносу при проміжних значеннях хвильового вектора, форми динамічного структурного фактора важливим є врахування співвідношень нелокальної термодинаміки. В роботі показано, що при такому врахуванні лінії динамічного структурного фактора відтворюються найточніше; даний результат має досить непогане узгодження як з машинним, так і з реальним експериментом з розсіювання нейтронів в рідкому Ar .

На захист виносяться такі положення:

1. Отримання системи рівнянь переносу та рівнянь для часових кореляційних функцій двокомпонентної плазми у внутрішньому електромагнітному полі з перенормованими коефіцієнтами переносу за рахунок врахування як кінетики частинок плазми так і кінетики осциляторів поля.
2. Розрахунок спектру колективних збуджень двокомпонентної плазми в довгохвильовій границі у власному електромагнітному полі.
3. Вирази для функціоналу ентропії, термодинамічних сил та гідродинамічних швидкостей в гаусовому та вищих за колективними змінними наближеннях у випадку простих та іонних рідин.
4. Вирази для дисперсії коефіцієнтів переносу простих та іонних рідин. Розрахунок коефіцієнта при неаналітичності $k^{5/2}$ у виразі для звукової частоти.
5. Чисельний розрахунок динамічного структурного фактора простих рідин в наближенні взаємодіючих мод, квадратичному за флуктуаціями.

Апробація роботи. Результати дисертації доповідались і обговорювались на Міжнародній конференції "Фізика в Україні" (Київ, 1993 р.), а також на семінарах Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України та на семінарах відділу теорії нерівноважних процесів цього інституту.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 11 робіт, що перераховані в кінці автореферату. У спільних публікаціях авторові належить отримання виразів для спектру колективних збуджень слабонерівноважної плазми у внутрішньому електромагнітному полі, розрахунок вищих за флуктуаціями вкладів у вирази для гідродинамічних швидкостей, розрахунок дисперсії коефіцієнтів переносу простих та іонних рідин, а також чисельний розрахунок динамічного структурного фактора простої рідини, аналіз звукової моди та отримання коефіцієнта при неаналітичному доданку $\sim k^{5/2}$ у виразі для частоти звуку.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається з вступу, трьох розділів, висновків та списку цитованої літератури. Робота викладена на 101 сторінці (разом з літературою – 113), включає бібліографічний список, що містить 108 найменувань у вітчизняних та зарубіжних виданнях.

ЗМІСТ РОБОТИ

Вступ. Подано огляд робіт, в яких проводилось дослідження нелінійних флуктуацій в різноманітних фізичних системах. Наголошено на необхідності врахування впливу кінетичних явищ на загальний перебіг процесів чисто гідродинамічної природи. Розглянуто основні принципи, на яких базується побудова теорії взаємодіючих мод, її основні результати та межі застосовності даної теорії.

Висвітлено актуальність теми дисертаційної роботи, дано її загальну характеристику, викладено короткий зміст кожного розділу, сформульовано основні положення, що виносяться на захист.

Перший розділ називається "Узгоджений опис кінетики і гідродинаміки плазми у власному електромагнітному полі". У цьому розділі на основі методу нерівноважного статистичного оператора Д.М.Зубарєва отримано систему рівнянь переносу для густин числа частинок, імпульсу та енергії двокомпонентної слабо-нерівноважної плазми у внутрішньому електромагнітному полі. Врахування польових змінних базується на формалізмі рівнянь для фазової густини осциляторів поля, для яких можна записати рівняння Гамільтона, що по своїй суті є рівняннями для вихрових складових полів: електричного $\mathbf{E}^{\perp}(\mathbf{r})$ та магнітного $\mathbf{B}(\mathbf{r})$. Отримано рівняння для середніх значень вказаних мікроскопічних полів. Характерною особливістю рівнянь переносу та рівнянь для осциляторів електромагнітного поля є перенормування функцій пам'яті за рахунок врахування кінетики частинок плазми.

Отримано систему рівнянь для часових кореляційних функцій. Внаслідок того, що у рівновазі відсутні кореляції між частинками плазми та осциляторами поля, рівноважна функція розподілу факторизується за матеріальними та польовими змінними.

Отже, можна зменшити кількість рівнянь для часових кореляційних функцій, розв'язуючи рівняння для перехресних кореляційних функцій "частинки плазми - осцилятори поля" та підставляючи їх значення у вирази для часових кореляційних функцій, побудованих на чисто гідродинамічних змінних. В отриманих рівняннях функції пам'яті, а отже і коефіцієнти переносу зазнають подвійного перенормування: як за рахунок кінетики частинок плазми так і за рахунок кінетики осциляторів електромагнітного поля.

Проведено аналіз спектру колективних збуджень двокомпонентної плазми у власному електромагнітному полі в довгохвильовій границі. Зокрема, вирази для поперечних мод мають наступний вигляд:

$$z_{\perp}(\mathbf{k}) = -i\mathbf{k}^2 D_{\perp} + o(\mathbf{k}^4)$$

-для чисто дифузійної моди та

$$\bar{z}_{\perp}(\mathbf{k}) = -i(\bar{\nu}_{\perp} + \mathbf{k}^2 \bar{D}_{\perp}) + o(\mathbf{k}^4)$$

-для релаксаційної моди. Для поздовжніх мод отримано наступні вирази:

$$z_{\varepsilon}(\mathbf{k}) = -i\mathbf{k}^2 D_{\varepsilon} + o(\mathbf{k}^4)$$

-гідродинамічна мода, що описує процес переносу тепла;

$$\bar{z}_{\varepsilon}(\mathbf{k}) = -i(\bar{\nu}_{\varepsilon} + \mathbf{k}^2 \bar{D}_{\varepsilon}) + o(\mathbf{k}^4)$$

-релаксаційна мода, зв'язана з переносом енергії;

$$z_{\pm}^s(\mathbf{k}) = \pm c\mathbf{k} - i\mathbf{k}^2 \Gamma + o(\mathbf{k}^4)$$

-дві звукові моди, c - швидкість звуку, Γ - коефіцієнт затухання звуку;

$$z_e(\mathbf{k}) = \omega_e + \mathbf{k}^2(\gamma_e - i\Gamma_e) + o(\mathbf{k}^4)$$

-релаксаційні моди, пов'язані з переносом заряду.

Показано, що внаслідок включення до базисних змінних парціальних величин, у спектрі колективних збуджень крім чисто гідродинамічних мод, які прямують до нуля при $k \rightarrow 0$, присутні також релаксаційні моди з відмінними від нуля значеннями при

$k = 0$. Поява останніх колективних мод пов'язана з міжсортною взаємодією частинок і є характерною для багатокомпонентних систем. Вирази для відповідних коефіцієнтів колективних мод (звукових, дифузійних, релаксаційних) визначаються як недисипативними характеристиками (Ω - функціями), так і дисипативними величинами (функціями пам'яті, побудованими на мікроскопічних дисипативних потоках та релаксаційними матрицями, побудованими на мікроскопічних силах Лоренца).

Внаслідок того, що у випадку плазми у власному електромагнітному полі зберігаються лише повний імпульс та повна енергія системи "частинки - поле", вирази для колективних мод відрізнятимуться від результатів чисто кулонівської плазми. Порівнянням отриманих результатів з даними кулонівської плазми та обговоренням відмінностей закінчується перший розділ дисертації.

Другий розділ називається "Дослідження нелінійних флуктуацій в простих рідинах". В даному розділі на основі рівняння Фоккера - Планка для нерівноважної функції розподілу динамічних змінних - густин числа частинок, імпульсу та ентальпії - проводиться дослідження нелінійних флуктуацій в простих рідинах. З використанням методу колективних змінних - фур'є-трансформантів динамічних змінних, про які йшлося вище, проводиться послідовний розрахунок статистичної ваги $W(a)$, через яку виражається ентропійний функціонал $S(a)$, термодинамічних сил $F(a)$ та гідродинамічних швидкостей $v(a)$. Розрахунок проводиться як в гаусовому наближенні за колективними змінними, так і у вищих наближеннях. В загальному вигляді вирази для гідродинамічних швидкостей можна представити наступним чином:

$$v_{m\mathbf{k}}(a) = \sum_i i\Omega_{mi}(\mathbf{k})a_{i\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i,j} V_{mij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')a_{i\mathbf{k}-\mathbf{k}'}a_{j\mathbf{k}'} + o(a^3),$$

де

$$i\Omega_{mi}(\mathbf{k}) = \frac{\langle \hat{a}_{m\mathbf{k}} \hat{a}_{i-\mathbf{k}} \rangle_0}{\langle \hat{a}_{i\mathbf{k}} \hat{a}_{i-\mathbf{k}} \rangle_0}$$

-частотна матриця, $\hat{a}_{m\mathbf{k}} = iL\hat{a}_{m\mathbf{k}}$, iL - оператор Ліувілля, сумування проводиться за всіма колективними змінними, а усереднен-

ня- за рівноважним розподілом;

$$V_{mij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\langle \hat{a}_{m-\mathbf{k}} \hat{a}_{i\mathbf{k}'} \hat{a}_{j\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \rangle_0}{\langle \hat{a}_{i\mathbf{k}'} \hat{a}_{i-\mathbf{k}'} \rangle_0 \langle \hat{a}_{j\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \hat{a}_{j\mathbf{k}'-\mathbf{k}} \rangle_0} - \sum_l \frac{\langle \hat{a}_{l-\mathbf{k}} \hat{a}_{i\mathbf{k}'} \hat{a}_{j\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \rangle_0 \langle \hat{a}_{m\mathbf{k}} \hat{a}_{l-\mathbf{k}} \rangle_0}{\langle \hat{a}_{l\mathbf{k}} \hat{a}_{l-\mathbf{k}} \rangle_0 \langle \hat{a}_{i\mathbf{k}'} \hat{a}_{i-\mathbf{k}'} \rangle_0 \langle \hat{a}_{j\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \hat{a}_{j\mathbf{k}'-\mathbf{k}} \rangle_0}$$

В гаусовому наближенні для гідродинамічних швидкостей $v(a)$ узагальнені коефіцієнти дифузії, що входять в рівняння Фоккера - Планка, переходять у формули Гріна - Кубо для узагальнених коефіцієнтів переносу (в'язкості, теплопровідності, перехресних коефіцієнтів) при фіксованих значеннях базисних змінних. У вищих наближеннях для нелінійних за колективними змінними вкладів у гідродинамічні швидкості, які визначають "незвідні" частини часових кореляційних функцій, отримано результат, який по своїй структурі нагадує розклад за ортонормованим базисом вищих флуктуацій.

Згадані нелінійні доданки приводять до появи просторово - часової дисперсії коефіцієнтів переносу. В довгохвильовій границі можна провести розщеплення "незвідних" частин часових кореляційних функцій, які являють собою четвірні часові кореляційні функції, і після переходу від суми по \mathbf{k} до інтегралу можна отримати явні вирази для просторово - часової дисперсії кінетичних коефіцієнтів $D_{mn}(\mathbf{k}, \omega)$, що визначають відповідні коефіцієнти переносу:

$$D_{mn}(\mathbf{k}, \omega) = D_{mn}(0, 0) + \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} [M_{mn}(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{k}', \omega') - M_{mn}(0, 0; \mathbf{k}', \omega')] ,$$

де

$$M_{mn}(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{k}', \omega') = \sum_{l, s, l', s'} V_{mls}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') V_{n'l's'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \times$$

$$\times (G_{ll'}^0(\mathbf{k}', \omega') G_{ss'}^0(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega') + G_{l's'}^0(\mathbf{k}', \omega') G_{ls}^0(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega')) ,$$

а $G_{mn}^0(\mathbf{k}, \omega)$ - часові кореляційні функції лінійної гідродинаміки. Матриці $V_{mij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, що зв'язують відповідні гідродинамічні швидкості з вищими (в нашому випадку - квадратичними за колективними змінними) членами, виражаються через потрібні статичні

кореляційні функції. Виражаючи наближено потрійні статичні кореляційні функції через парні, для яких відомі як поведінка в області проміжних значень хвильового вектора \mathbf{k} , так і асимптотика при $k \rightarrow \infty$, можна обчислити дисперсію коефіцієнтів переносу і отримати вирази для часових кореляційних функцій. В області малих значень хвильового вектора можна обмежитись наближенням локальної термодинаміки, виділяючи у $V_{mij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ значення мікроскопічних потоків $\hat{I}_{n\mathbf{k}}$ ($\dot{\hat{a}}_{n\mathbf{k}} = -i\mathbf{k}\hat{I}_{n\mathbf{k}}$) та беручи довгохвильову границю $k \rightarrow 0$, $k' \rightarrow 0$ у відповідних виразах для потрійних статичних кореляційних функцій. Як відомо, в такому випадку потрійні статичні кореляційні функції можна виразити через відповідні термодинамічні співвідношення, звідси і назва наближення. У випадку проміжних значень \mathbf{k} , взагалі то, слід приймати до уваги залежність $V_{mij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ від \mathbf{k} , \mathbf{k}' у всій області хвильових векторів (наближення нелокальної термодинаміки).

Проведено чисельні розрахунки дисперсії коефіцієнтів переносу простої рідини і отримано вирази для динамічного структурного фактора.

Розрахунки проводились для простої рідини з модельним потенціалом Леннарда - Джонса $\Phi_{LJ}(r) = 4\epsilon_{LJ} [(\sigma_{LJ}/r)^{12} - (\sigma_{LJ}/r)^6]$ з ефективним радіусом взаємодії σ_{LJ} та характерним часом кореляції $\tau_\sigma = \sigma_{LJ}(m/\epsilon_{LJ})^{1/2}$ при зведеній густині $n^* = n\sigma_{LJ}^3 = 0.845$ та зведеній температурі $T^* = k_B T / \epsilon_{LJ} = 1.706$.

Результати для динамічного структурного фактора представлені на рис.1 та 2.

Видно, що при $k^* = k_{min} \equiv 0.936$ ($k^* = k\sigma_{LJ}$) врахування ефектів нелокальної термодинаміки дає значно кращий результат в порівнянні з результатами локальної термодинаміки.

При $k^* = 3k_{min}$ результати наближення локальної термодинаміки зовсім не описують реальної картини; що стосується наближення нелокальної термодинаміки, то принаймні форма піку Релея частково відтворює результати молекулярної динаміки. Однак видно, що вже при таких значеннях k^* теорія взаємодіючих мод не дає доброї відповідності з машинним експериментом.

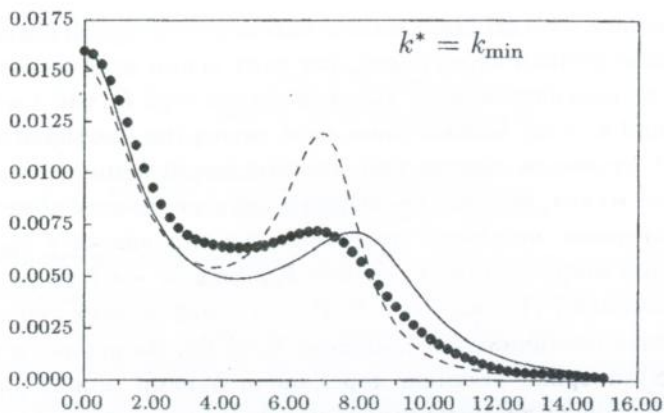


Рисунок 1. Залежність структурного фактора $S(\mathbf{k}, \omega)\pi/\tau_\sigma$ від частоти $\omega^* = \omega\tau_\sigma$ при $k^* = k_{\min}$. • -результати молекулярної динаміки; --- -наближення локальної термодинаміки; — - наближення нелокальної термодинаміки.

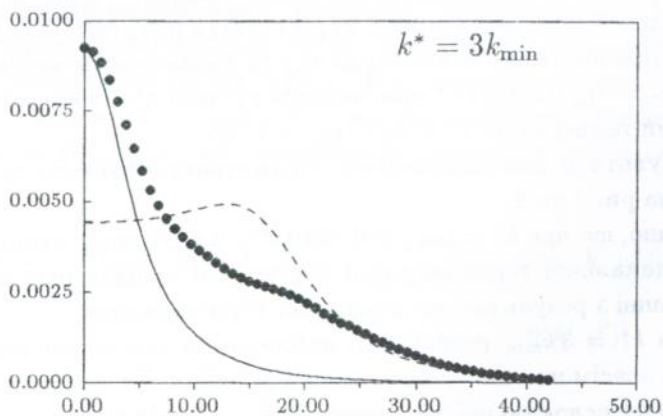


Рисунок 2. Залежність структурного фактора $S(\mathbf{k}, \omega)\pi/\tau_\sigma$ від частоти $\omega^* = \omega\tau_\sigma$ при $k^* = 3k_{\min}$. • -результати молекулярної динаміки; --- -наближення локальної термодинаміки; — - наближення нелокальної термодинаміки.

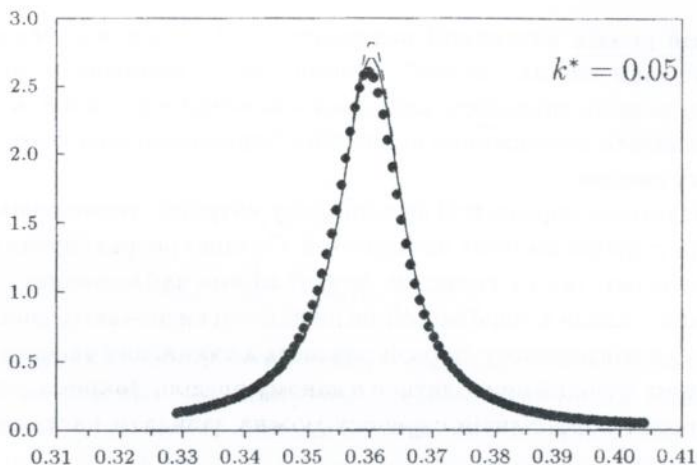


Рисунок 3. Положення піку Бріллюена динамічного структурного фактора $S(\mathbf{k}, \omega)\pi/\tau_\sigma$ як функції частоти $\omega^* = \omega\tau_\sigma$ при $k^* = 0.05$. • - результати лінійної гідродинаміки; --- - наближення локальної термодинаміки; — - наближення нелокальної термодинаміки.

При малих значеннях k^* можна повністю обмежитись наближенням локальної термодинаміки, що добре видно з рис.3.

Було проведено розрахунок коефіцієнтів переносу на звуковій частоті ck , що дало змогу знайти коефіцієнт a при неаналітичному доданку у виразі для звукової моди $\omega(k) = \pm ick + \gamma k^2 + (\pm i - 1)ak^{5/2}$.

Область k^* , при яких ще працює теорія взаємодіючих мод, добре простежується з таблиці, де представлено залежність коефіцієнта a від k^* .

k^*	10^{-4}	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$5 \cdot 10^{-3}$	10^{-2}	$5 \cdot 10^{-2}$	0.1	0.5	1	2
a	0.935	0.903	0.898	0.924	0.907	0.863	0.856	0.564	0.395	0.322

Видно, що починаючи зі значення $k^* = 0.5$ характерна неаналітична поведінка звукової частоти порушується. Це, очевидно, і визначає область значень k^* , починаючи з яких теорія взаємодіючих мод починає "погано працювати".

Третій розділ дисертації називається "Дослідження нелінійних флуктуацій іонних систем". Формалізм, розвинений в попередньому розділі, знаходить своє застосування і в розділі 3, в якому проводиться дослідження нелінійних гідродинамічних флуктуацій іонних систем.

Отримано вирази для функціоналу ентропії, термодинамічних сил та гідродинамічних швидкостей. Останні розраховувались як у гаусовому, так і у вищих за флуктуаціями наближеннях. Флуктуаційні вклади в гідродинамічні швидкості визначають дисперсію коефіцієнтів переносу, вирази для яких а також для часових кореляційних функцій приводяться в даному розділі. Зокрема, для узагальнених коефіцієнтів переносу можна записати наступні співвідношення:

$$\eta_{k\omega} = \eta^{(0)} + \frac{1}{2Tk^2} \left(\hat{v}_{j_m^\alpha} \hat{v}_{j_m^\beta} \right)_{k\omega}^{(c)} (\delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta),$$

$$\frac{4}{3} \eta_{k\omega} + \zeta_{k\omega} = \frac{4}{3} \eta^{(0)} + \zeta^{(0)} + \frac{1}{Tk^2} n_\alpha n_\beta \left(\hat{v}_{j_m^\alpha} \hat{v}_{j_m^\beta} \right)_{k\omega}^{(c)},$$

$$\Lambda_{k\omega} = \Lambda^{(0)} + \frac{1}{T^2 k^2} (\hat{v}_h \hat{v}_h)_{k\omega}^{(c)},$$

$$\rho_{k\omega} = 1/\sigma^{(0)} + \frac{1}{T} \frac{4\pi}{\omega_p^2} (\hat{v}_{j_e} \hat{v}_{j_e})_{k\omega}^{(c)}.$$

Тут $\eta_{k\omega}$ - узагальнений коефіцієнт зсувної в'язкості, $\zeta_{k\omega}$ - узагальнений коефіцієнт об'ємної в'язкості, $\Lambda_{k\omega}$ - узагальнений коефіцієнт теплопровідності, $\rho_{k\omega}$ - узагальнений коефіцієнт електричного опору, індексами (0) позначаються "затравочні" значення коефіцієнтів переносу (зокрема, $\sigma^{(0)}$ - "затравочне" значення коефіцієнта електропровідності), T - температура, ω_p - плазмова частота, $n_\alpha = k_\alpha/|k|$, а "незвідні" частини кореляційних функцій, що визначають дисперсію коефіцієнтів переносу, визначаються квадратичними і вищими вкладками у гідродинамічні швидкості $\hat{v}_{ik} = \{\hat{j}_{mk}, \hat{j}_{ek}, \hat{h}_k\}$. Тут \hat{j}_{mk} - густина імпульсу, \hat{j}_{ek} - густина струму, \hat{h}_k - густина узагальненої ентальпії.

Поряд з цими коефіцієнтами переносу існують коефіцієнти, пов'язані з кореляційними функціями $(\hat{v}_{j_m^\alpha} \hat{v}_h)_{k\omega}^{(c)}$, $(\hat{v}_{j_e} \hat{v}_h)_{k\omega}^{(c)}$ та

$$\left(\hat{v}_{j_m^\alpha} \hat{v}_{j_e^\beta} \right)_{k\omega}^{(c)}$$

$$\xi_{k\omega} = \frac{1}{T k^2} \frac{\omega}{|\omega|} n_\alpha \left(\hat{v}_{j_m^\alpha} \hat{v}_h \right)_{k\omega}^{(c)},$$

$$\lambda_{k\omega} = \frac{1}{T k^2} \frac{\omega}{|\omega|} n_\alpha \left(\hat{v}_{j_e^\alpha} \hat{v}_h \right)_{k\omega}^{(c)},$$

$$\nu_{k\omega} = \frac{1}{T k} \frac{\omega}{|\omega|} n_\alpha n_\beta \left(\hat{v}_{j_e^\alpha} \hat{v}_{j_m^\beta} \right)_{k\omega}^{(c)}$$

-відповідно, коефіцієнт, який описує в'язкі та теплові процеси, а також коефіцієнти, що описують термоелектричні та електрострикційні властивості системи заряджених частинок, при чому $\xi_{k\omega} = 0$ при $k \rightarrow 0$, а $\lambda_{k\omega}$ та $\nu_{k\omega}$ при $k \rightarrow 0$ мають відмінне від нуля значення, оскільки потік заряду \hat{j}_{ek} не зберігається.

Внаслідок того, що серед базисних динамічних змінних присутня неконсервативна величина - густина струму, у виразах для кінетичних коефіцієнтів, які визначають відповідні коефіцієнти переносу, крім чисто дифузійних вкладів присутні релаксаційні доданки. Зокрема, у виразі для узагальненого електричного опору можна виділити два доданки:

$$D_{j_e j_e}(\mathbf{k}, \omega) = T \omega_p^2 / 4\pi \rho(\mathbf{k}, \omega) = R(\mathbf{k}, \omega) k^2 + r(\omega),$$

де розділено два вклади: чисто релаксаційний $r(\omega) = D_{j_e j_e}(0, \omega)$ і залежний від \mathbf{k}, ω $R(\mathbf{k}, \omega) = (D_{j_e j_e}(\mathbf{k}, \omega) - D_{j_e j_e}(0, \omega)) / k^2$.

Основні результати та висновки

1. На основі методу нерівноважного статистичного оператора Д. М. Зубарева отримані рівняння переносу та рівняння для часових кореляційних функцій слабонерівноважної плазми у власному електромагнітному полі при послідовному врахуванні кінетики та гідродинаміки частинок плазми та кінетики осциляторів поля.
2. Проведено дослідження колективних мод для вказаної системи в довгохвильовій границі. Отримані вирази як для гідродинамічних, так і для релаксаційних мод, які мають відмінні від нуля значення при $k \rightarrow 0$.

3. Проведено дослідження нелінійних гідродинамічних флуктуацій простих та іонних рідин. Отримані вирази для функціоналу ентропії, термодинамічних сил та гідродинамічних швидкостей як в гаусовому так і у вищих наближеннях за колективними змінними.
4. На основі теорії взаємодіючих мод отримані вирази для дисперсії коефіцієнтів переносу. Показано, що з точністю до нормувального множника вищі за флуктуаціями вклади в гідродинамічні швидкості, які визначають залежність від k , ω коефіцієнтів переносу, співпадають з результатами теорії проєкційних операторів на базисі вищих флуктуацій.
5. Проведено чисельний розрахунок динамічного структурного фактора простої рідини з модельним потенціалом Леннарда - Джонса та дослідження дисперсії звуку. Результати порівнюються з даними молекулярної динаміки та експерименту за розсіюванням нейтронів.

Результати дисертації опубліковані в таких роботах:

- [1] Ігнатюк В.В., Токарчук М.В. Статистическая теория нелинейных гидродинамических флуктуаций ионных систем. // Теор. и мат. физика. -1996. -Т.108. № 3. -стр. 448-464.
- [2] Ідзик І.М., Ігнатюк В.В., Токарчук М.В. Рівняння Фоккера - Планка для нерівноважної функції розподілу колективних змінних. I. Розрахунок статистичної ваги, ентропії, гідродинамічних швидкостей.// Укр. фіз. журн., -1996. -Т.41. №5-6. -стор. 596-604.
- [3] Ідзик І.М., Ігнатюк В.В., Токарчук М.В. Рівняння Фоккера - Планка для нерівноважної функції розподілу колективних змінних. II. Розрахунок просторово-часової дисперсії коефіцієнтів переносу.// Укр. фіз. журн., -1996. -Т.41. №10. -стор. 1017-1021.
- [4] Токарчук М.В., Ігнатюк В.В. Узгоджений опис кінетики та гідродинаміки плазми у власному електромагнітному полі. I. Рівняння переносу // Укр. фіз. журн. -1997. -Т.42. №2. - стор. 153-159.

- [5] Токарчук М.В., Ігнатюк В.В. Узгоджений опис кінетики та гідродинаміки плазми у власному електромагнітному полі. II. Часові кореляційні функції та колективні моди. // Укр. фіз. журн. -1997. -Т.42. №2. -стор. 159-163 .
- [6] Ignatjuk V.V., Tokarchuk M.V. Transfer processes in two - component plasma in the self - electromagnetic field. The equations of hydrodynamics and fluctuations. - Львів, 1993. -21 стор. -(Препринт /АН України. ІФКС; ISMP- 93-1E).
- [7] Токарчук М.В., Ігнатюк В.В. До нерівноважної статистичної теорії плазми у власному електромагнітному полі. II. Узгоджений опис кінетики і гідродинаміки. -Львів, 1993. -29 стор. -(Препринт/АН України. ІФКС; ІФКС-93-16У).
- [8] Токарчук М.В., Ігнатюк В.В. Статистична теорія нелінійних гідродинамічних флуктуацій іонних розплавів. -Львів, 1994. -27 стор. -(Препринт/АН України. ІФКС; ІФКС-94-23 У).
- [9] Ігнатюк В.В., Токарчук М.В. Розрахунок дисперсії коефіцієнтів переносу та динамічного структурного фактора простих рідин на основі рівняння Фоккера - Планка для нерівноважної функції розподілу колективних змінних. -Львів, 1996. -8 стор. -(Препринт/НАН України. ІФКС; ISMP-96-27U).
- [10] Ігнатюк В.В., Токарчук М.В. Узгоджений опис кінетики та гідродинаміки плазми у власному електромагнітному полі. II. Часові кореляційні функції та колективні моди. -Львів, 1996. -11 стор. -(Препринт/НАН України. ІФКС; ISMP-96-28U).
- [11] Ignatjuk V.V., Tokarchuk M.V. An influence of the internal fields on the transfer processes in 2 - component plasma. In: Abstracts and contributed papers of International Conference "Physics in Ukraine", Kiev, 1993, p.122-125.

Ignatjuk V.V. The research of nonlinear fluctuations in simple and ionic liquids with self - consistent description of kinetics and hydrodynamics.

Thesis on search of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.14 – heat physics and molecular physics. Institute for Condensed Matter Physics of the Ukrainian National Academy of Sciences, Lviv, 1997.

The 11 scientific papers, which present the results of theoretical research of transfer equations and time correlations functions of weakly nonequilibrium plasma in the self - electromagnetic field as well as nonlinear fluctuations in the simple and ionic liquids, are being defended. The investigations of the systems mentioned above is being carried out with self-consistent description of kinetics and hydrodynamics. One has obtained the expressions for the entropy functional, thermodynamic forces and hydrodynamic velocities both in gaussian and higher orders in collective variables with going out from the framework of viscous elastic approximation. The time-spatial dispersion of the transport coefficients is being investigated. The numerical calculation of dynamical structure factor of the simple liquid and the analysis of sound mode have been performed in approximation quadratic in fluctuations.

Игнатюк В.В. Исследования нелинейных флуктуаций в простых и ионных жидкостях при согласованном описании кинетики и гидродинамики.

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и молекулярная физика. Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 1997.

Защищается 11 научных работ, которые содержат результаты теоретического исследования уравнений переноса и временных корреляционных функций слабонеравновесной плазмы во внутреннем электромагнитном поле а также нелинейных флуктуаций в простых и ионных жидкостях. Исследование указанных выше объектов происходит при согласованном описании кинетики и гидродинамики. Получены выражения для функционала энтропии, термодинамических сил и гидродинамических скоростей как в гауссовом так и в высших порядках по коллективным переменным при выходе за рамки вязкоэластического приближения. Исследуется пространственно - временная дисперсия коэффициентов переноса. Произведен численный расчет динамического структурного фактора простой жидкости а также анализ звуковой моды в приближении, квадратичном по флуктуациям.

Ключові слова: рівняння переносу, часові кореляційні функції, нелінійні флуктуації, дисперсія коефіцієнтів переносу.

2002

АВ 36.915

Підписано до друку 13.2.97. Формат 60 × 84/16.
Друк офсетний. Ум. друк. арк. 1,0. Тираж 100. Зам 5388.
Друк. ПТУ №58. 290008, Львів, вул. Ів. Федорова, 9