01;03

К определению барнеттовских кинетических коэффициентов в неидеальных средах

© Г.А. Павлов

Институт проблем химической физики РАН,
142432 Черноголовка, Московская обл., Россия
e-mail: pavl4411@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 11 января 2011 г.)

Обсуждены подходы к определению линеаризованных и нелинейных барнеттовских кинетических коэффициентов в средах с сильным межчастичным взаимодействием. Предложен способ вычисления линеаризованных барнеттовских кинетических коэффициентов с использованием длинноволновых и низкочастотных асимптотик для корреляционных функций заряженных неидеальных сред.

Теория отклика является основой для теоретического исследования теплофизических свойств неидеальных сред, которые характеризуются сильным межчастичным взаимодействием. Функции реакции в данной теории описывают отклик среды на электрическое и электромагнитное поля, градиенты массовой скорости, температуры, химических потенциалов химических элементов, концентраций химических элементов и т. п. С помощью функций реакции исследуются термодинамические, переносные (реологические) и оптические характеристики неидеальных сред. Теория отклика формулируется как относительно механических, так и термических возмущений. Механические возмущения среды возникают под действием внешних полей, при этом гамильтониан системы является суммой невозмущенного гамильтониана среды и гамильтониана взаимодействия среды с внешним полем. Термические возмущения среды (возмущения температуры, массовой скорости, среднее поле в среде и т. п.), которые не допускают такого описания, инициируют, как и механические возмущения, процессы переноса в среде.

Различают теории линейного и нелинейного откликов. Теория линейного отклика (см., например, [1,2]), используя которую проведены исследования различных свойств неидеальных сред, достаточно хорошо разработана. Изучение линейных характеристик выполнено, в частности, методами компьютерного моделирования для неидеальных кулоновских и нейтральных систем (см., например, [3]). В то же время теория нелинейного отклика развита недостаточно. Для нелинейных функций реакции, соответствующих корреляционных функций, по-существу, отсутствуют как теоретические результаты, так и данные компьютерного моделирования. Поэтому исследования по теории нелинейного отклика являются актуальными.

Рассмотрим подходы к описанию нелинейных переносных процессов. Для расчета линеаризованных и нелинейных барнеттовских кинетических коэффициентов [4] в случае сред со слабым межчастичным взаимодействием (газа или плазмы) применяются кинетические уравнения (например, уравнение Больцмана и др.) и хорошо известный метод Чепмена–Энскога [5]. Определение барнеттовских кинетических коэффициентов неидеальной многоэлементной заряженной среды (плазмы) проведено по варианту теории отклика на термические возмущения, предложенному в [6–8]. Эти результаты могут использоваться и для других сплошных заряженных сред: одно- и двухкомпонентных кулоновских систем, электролитов, жидких металлов, ядерной материи, а также для плотных нейтральных сред. Подход [6–8] заключается в сопоставлении феноменологических уравнений сохранения заряженной сплошной среды и уравнений движения для операторов соответствующих динамических переменных в форме обобщенных уравнений Ланжевена. При выводе уравнений движения операторов динамических переменных использован алгоритм [9,10]. Заметим, что в данном подходе информация о виде уравнений сохранения и потоков массы, тепла, импульса и заряда определяет микроскопические выражения для транспортных коэффициентов в потоках.

В работе обсуждаются подходы к определению линеаризованных и нелинейных (квадратичных) барнеттовских кинетических коэффициентов. Проведено вычисление линеаризованных кинетических коэффициентов через длинноволновый и низкочастотный пределы соответствующих функций реакции и корреляционных функций неидеальной заряженной среды (модельной кулоновской системы).

1. Выпишем систему обобщенных уравнений Ланжевена (ОУЛ), т. е. систему операторных уравнений для неидеальной многоэлементной заряженной среды и для термических возмущений (см., например, [6–10], $B(t)$ — вектор операторов динамических переменных в представлении Гейзенберга, $\rho(t)$ — матрица плотности, H — гамильтониан системы, $\beta = 1/k_BT$, T — температура среды, k_B — константа Больцмана, $\widetilde{\exp}$ — упорядоченная экспонента [1])

$$\frac{d}{dt}B(t) - i\omega B(t) + \int_{t_0}^{t} dt'\varphi(t-t';t_0)B(t') = f(t;t_0) + r(t;t_0)B(t_0),$$

$$\varphi(t;t_0) = Tr\rho(t)$$

$$\times \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda H} f(t;t_0) e^{-\lambda H} f(t_0;t_0)/\langle B(t_0); B(t_0)\rangle,$$

$$r(t;t_0) = Tr\rho(t)$$

$$\times \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda H} B(t_0) e^{-\lambda H} K(t_0) \bullet \Sigma(t_0 - t;t_0)/\langle B(t_0); B(t_0)\rangle,$$

$$f(t;t_0) = V^+(t,t_0) K(t_0) V(t,t_0);$$

$$V(t,t_0) = \tilde{\exp}\left\{-i(1-P)\int_{t_0}^{t} dt' H(t')\right\}, \qquad (1)$$

$r(t;t_0) = 0$ в линейном случае (когда $\rho(t) = \rho_0$, см., например, [10]),

$$Tr\rho(t) \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda H} f(t;t_0) e^{-\lambda H} B(t_0) = 0,$$

$$\langle A(t); B(t_0)\rangle = Tr\rho(t_0) \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda H} A(t) e^{-\lambda H} B(t_0). \qquad (1')$$

Сформулируем определение проекционного оператора (P) и другие определения в ОУЛ

$$PG(t) = \frac{\langle G(t); B(t_0)\rangle}{\langle B(t_0); B(t_0)\rangle} \bullet B(t_0),$$

$$B(t) = \sum(t;t_0) \bullet B(t_0) + B'(t),$$

$$\sum(t;t_0) = \langle B(t); B(t_0)\rangle / \langle B(t_0); B(t_0)\rangle,$$

$$B'(t) = (1-P)B(t), \quad \dot{B}(t_0) = i\omega B(t_0) + K(t_0),$$

$$i\omega = \left[\frac{d}{dt}\Sigma(t;t_0)\right]_{t=t_0}, \quad K(t_0) = (1-P)\dot{B}(t_0).$$

Нелинейность обобщенного уравнения Ланжевена (1) следует из зависимостей матрицы плотности системы и, следовательно, „частот“ ω, „транспортных коэффициентов“ $\varphi(t;t_0)$, $r(t;t_0)$ и „случайных сил“ $f(t;t_0)$ в этом уравнении от операторов динамических переменных $\{B(t)\}$.

Положим, что сумма третьего члена в левой части и второго в правой части ОУЛ (1) является аналитическим функционалом. Разложим данный функционал, удерживая два члена разложения и принимая во внимание координатную зависимость операторов [6–8], подставим разложение в (1), умножим справа на вектор $B(\mathbf{r})$ и усредним по матрице плотности. Далее подвергнем полученное выражение преобразованию Фурье–Лапласа и получим матричное уравнение для корреляционных функций второго и третьего порядков (первое уравнение в (2)). Второе уравнение в (2) следует из соотношения $zB(\mathbf{k},z) - B(\mathbf{k}) = -i\mathbf{k}\cdot\mathbf{J}_b$

$$zC_{BB}(k,z) - C_{BB}(k) = S(k)C_{BB}(k,z) - \Gamma(k,z)C_{BB}(k,z) - \Gamma_2(k,z)C_{BBB}(k,z),$$

$$A\frac{k^2 J_{BB}}{z^2} = -C_{BB}(k,z) + z^{-1}C_{BB}(k) - z^{-2}S(k)C_{BB}(k). \qquad (2)$$

Здесь $A = Vk_BT$; V — объем среды; $C_{BBB}(k,z)$, $C_{BB}(k,z)$, $C_{BB}(k)$, $J_{BB}(k,z)$ — тройные и парные корреляционные функции плотностей и потоков (см. ниже (10), (19)); $S(k)$ соответствует $i\omega$ в (1); $\Gamma(k,z)$, $\Gamma_2(k,z)$ — преобразованиям Фурье–Лапласа от первого и второго членов разложения функционала в ОУЛ. После исключения $C_{BB}(k,z)$ из (2) и расщепления полученного уравнения по степеням волнового вектора k будем иметь

$$Vk_BT\frac{k^2 J_{BB}}{z^2} - \frac{[z - S(k)]C_{BB}(k)}{z^2} = -\frac{C_{BB}(k)}{z - S(k) + \Gamma(k,z)},$$

$$Vk_BT\frac{k^2 J_{BB}(\sim k)}{z^2} = \frac{\Gamma_2(k,z) : C_{BBB}(k,z)}{z - S(k) + \Gamma(k,z)}. \qquad (3)$$

В (3) матрица $[z - S(k) + \Gamma(k,z)]^{-1}$ является сомножителем слева, корреляционная функция потоков $\sim k^0$ в линейном случае и $\sim k$ в линеаризованном и нелинейном случаях. Первое уравнение в (3) использовано в [2] для исследования обычных кинетических коэффициентов (линейный случай) и в [6–8] — линеаризованных барнеттовских кинетических коэффициентов. Последнее уравнение в (3) применимо для определения нелинейных кинетических коэффициентов [7,8].

2. Согласно подходу [6–8], уравнения (2), (3) сопоставляются с барнеттовскими феноменологическими уравнениями сохранения для сплошной среды. Уравнения сохранения формулируются относительно набора плотностей $\{B(r,t)\}$. Уравнение энергии — плотность Q, уравнения диффузии химических элементов — ρ_m, c_a, уравнение неразрывности — ρ_m, динамические уравнения — v_l и v_t (продольная и поперечная компоненты массовой скорости $\mathbf{u}$). Плотности $\{B(r,t)\}$ соответствуют вектору операторов динамических переменных в ОУЛ, операторные определения плотностей приведены, например, в [2]. Уравнения сохранения следует записать при определенном выборе выражений для потоков тепла, массы, заряда и импульса. В этом случае система уравнений сохранения с использованием локальной аппроксимации для нелинейных кинетических коэффициентов после преобразования Фурье–Лапласа сводится к системе алгебраических уравнений [6–8]:

$$zB(k,z) - B(k) = -k^2M(k,z)X(k,z) - ik^3M_2(k,z) : XX,$$

$${}^tB = \left[Q(k,z), \{\rho_m c_a(k,z)\}, \rho_m(k,z), v_l(k,z), v_t(k,z)\right],$$

$$Q(k,z) = u(k,z) - \rho_m(k,z)(u+p)/\rho_m,$$

$${}^tX = \left[T(k,z), \{\rho_m c_a(k,z)\}, \rho_m(k,z), v_l(k,z), v_t(k,z)\right],$$

$$B = R_{BX}X. \qquad (4)$$

В (4) u — плотность внутренней энергии, p — давление, ρ_m — плотность среды, c_a — массовая доля химического элемента a. Квадратная матрица M и кубическая M_2 содержат соответственно линейные, линеаризованные барнеттовские коэффициенты и нелинейные кинетические коэффициенты, а также термодинамические производные. Сопоставление (4) и (2) дает соотношение между $\Gamma(k,z)$, $\Gamma_2(k,z)$ и матрицами феноменологических кинетических коэффициентов

$$S(k)C_{BB}(k) + k^2 M(k,z)R^{-1}C_{BB}(k) = \Gamma(k,z)C_{BB}(k),$$

$$ik^3 M_2(k,z) : [R_{BX}^{-1}R_{BX}^{-1}] = \Gamma_2(k,z).$$

Данные соотношения и (3) определяют выражения для кинетических коэффициентов в линейном приближении и приближении Барнетта через длинноволновый и низкочастотный пределы соответствующих корреляционных функций ($\tilde{M}_2 = M_2 : [R^{-1}R^{-1}]$, в знаменателе выражений (5) $\Gamma(k,z)$ сохранена для удобства) [6–8]

$$Vk_BTJ_{BB} + S(k)C_{BB}(k)k^{-2} = \frac{M(k,z)R_{BX}^{-1}C_{BB}(k)}{1 + [\Gamma(k,z) - S(k)]/z},$$

$$Vk_BT\,\frac{k^2 J_{BB}(\sim k)}{z^2} = \frac{ik^3\tilde{M}_2(k,z) : C_{BBB}(k,z)}{z - S(k) + \Gamma(k,z)}. \quad (5)$$

Слагаемое с $S(k)$ в левой части первой формулы известно (см., например, в [2]). Для конкретных вычислений кинетических коэффициентов по (5) необходимо использовать длинноволновые пределы матриц в знаменателях выражений (предел $1 + [-S(k) + \Gamma(k,z)]/z$ найден, например, в [2]), длинноволновые пределы корреляторов „плотностей“ $\{B\}$ $C_{BBB}(k,z), C_{BB}(k,z), C_{BB}(k)$ и потоков $J_{BB}(k,z)$ (которые выражаются через корреляторы плотностей), а также термодинамические производные.

Первая формула из (5) для линейного случая может быть переписана в более простом виде, когда в нее входят только парные корреляционные функции. Определения для коэффициентов $\{\alpha\}$ в векторных потоках (6) имеют вид [2]

$$J_{\alpha\beta}(k,z) = \alpha_{\alpha\beta}(k,z) + (\varepsilon^{-1} - 1)\alpha_{\alpha\rho}\alpha_{\rho\beta}/\alpha_{\rho\rho}.$$

Здесь $\varepsilon = 1 + 4\pi\sigma/z$ — диэлектрическая проницаемость, σ — электропроводность среды, индекс „ρ“ соответствует объемному заряду в среде, коэффициент $\alpha_{\rho\rho}$ равен $m_e^2\sigma/e^2$ (e, m_e — заряд и масса электрона). Для нейтральных сред и коэффициентов $\{\beta\}$ в тензорных потоках последний (поляризационный) член в правой части отсутствует.

3. При вычислении линеаризованных и нелинейных барнеттовских кинетических коэффициентов по выражениям (5) ключевой является информация о длинноволновых пределах корреляторов потоков и $C_{BBB}(k,z)$, $C_{BB}(k,z)$. Длинноволновые пределы тройных корреляционных функций не изучены, что ограничивает возможности вычисления нелинейных коэффициентов. В то же время разработан аппарат для определения длинноволновых асимптотик $C_{BB}(k,z)$ с помощью соответствующих кинетических уравнений. Данное обстоятельство делает возможным вычисление линеаризованных барнеттовских кинетических коэффициентов из первого соотношения в (5), по крайней мере, для модельных систем. Например, для кулоновских систем, термодинамические и динамические характеристики которых известны (см., например, [3]). Выпишем соответствующие выражения для потоков тепла, массы (заряда) и импульса, которые определяют линеаризованные коэффициенты — α_{qv}, α_{av}, β_{va}, β_{vq} в сплошной многоэлементной заряженной среде. Остальные коэффициенты в (6) — линейные, нелинейные коэффициенты опущены (см., например, [5–8])

$$\mathbf{J}_q = -\sum_{a=1}^{N_a-1}\alpha_{qa}(\mathbf{L}_a - \mathbf{L}_{N_a}) - \alpha_{qq}\nabla\ln T - \alpha_{qv}\nabla^2\mathbf{u},$$

$$\mathbf{J}_a = -\sum_{a=1}^{N_a-1}\alpha_{ab}(\mathbf{L}_b - \mathbf{L}_{N_a}) - \alpha_{aq}\nabla\ln T - \alpha_{av}\nabla^2\mathbf{u},$$

$$\hat{\pi} = -\sum_{a=1}^{N_a-1}\beta_{va}\langle\nabla(\mathbf{L}_a - \mathbf{L}_{N_a})\rangle - \beta_{vq}\langle\nabla\nabla\rangle T - \beta_{vv}\langle\nabla\mathbf{u}\rangle. \quad (6)$$

Здесь N_a — число химических элементов, образующих среду, $\mathbf{L}_a = T\nabla(\mu_a/T) - \mathbf{F}_a$, $\mu_a(T, \rho_m c_a, \rho_m)$ — удельный химический потенциал химического элемента „a“; $\mathbf{F}_a$ — сила на единицу массы элемента a, $\langle\mathbf{cc}\rangle$ означает неприводимый тензор второго ранга с компонентами $c_i c_k - (1/3)c^2\delta_{ik}$.

Рассмотрим длинноволновые асимптотики $C_{BB}(k,z)$ в классическом пределе. Выпишем систему кинетических уравнений для корреляционных функций $C_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)$ (см. подробнее в [2])

$$\sum_{a_1=1,2}\sum_{\lambda=1}^{5}\left[z\delta_{\mu\lambda}\delta_{aa_1} - \Omega_{\mu\lambda}^{aa_1}(\mathbf{k}z)\right]C_{\lambda\nu}^{a_1b}(\mathbf{k}z) = iC_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}). \quad (7)$$

Здесь

$$C_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z) = \int d\mathbf{p}\,d\mathbf{p}' H_\mu^a(\mathbf{p})C^{ab}(\mathbf{k}z,\mathbf{pp}')H_\nu^b(\mathbf{p}'),$$

$$C_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{p}\,d\mathbf{p}' H_\mu^a(\mathbf{p})C^{ab}(\mathbf{kpp}')H_\nu^b(\mathbf{p}')$$

$$= \delta_{\mu\nu}\left[\delta_{ab} + \delta_{\mu n}(n_a/n_b)^{1/2}h^{ab}(k)\right],$$

$$\Omega_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z) = \Sigma_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z) + \sum_{a_1b_1}\langle H_\mu^a(\mathbf{p})|\Sigma^{aa_1}R^{a_1b_1}\Sigma^{b_1b}|H_\nu^b(\mathbf{p}')\rangle. \quad (8)$$

Через линейные комбинации $C_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)$ можно выразить $C_{BB}(k,z)$ из (5) (см. ниже (19), $N_a = 2$). В (8) $h^{ab}(k)$ — фурье-образ парной корреляционной функции, $R = \bar{Q}(z - Q\Sigma\bar{Q})^{-1}\bar{Q}$, где Σ^{ab} соответствует (9), Q —

оператор, дополняющий проекционный оператор P, построенный на полиномах набора $\{H_\mu^a(\mathbf{p})\}$. Набор состоит из полиномов

$$n_a^{-1/2},\ (\beta/\rho_a)^{1/2}p_z,\ (\beta/\rho_a)^{1/2}p_x,\ (\beta/\rho_a)p_y,$$

$$(6n_a)^{-1/2}(\beta p^2/m_a-3),\ \langle H_i^a H_j^a\rangle=\delta_{ij},$$

и

$$(\beta/10\rho_a)^{1/2}p_z(\beta p^2/m_a-5)$$

$$\bar{P}=\sum_{a=1,2}\sum_{i=1}^{5}|i_a\rangle\langle i_a|,\quad \bar{P}+\bar{Q}=1,\quad \bar{P}^2=\bar{P},\quad \bar{Q}^2=Q.$$

Здесь элемент i_a соответствует первым пяти из набора полиномов. Матричный элемент $\Sigma_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)$ соответствует интегралам в (8) от Σ^{ab} — суммы выражений в (9) (m_b, n_b, ρ_b — масса, концентрация и плотность частиц сорта b, $p_{x,y,z}$ — компоненты импульса, $\Phi(p)$ — распределение Максвелла)

$$\Sigma_0^{ab}(\mathbf{kpp}')=(\mathbf{kp}/m_a)\delta_{ab}\,\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'),$$

$$\Sigma_S^{ab}(\mathbf{kpp}')=-(\mathbf{kp}/m_a)\tilde{C}^{ab}(\mathbf{k})(n_a n_b)^{1/2}\Phi^b(p),$$

$$\Sigma_C^{ab}(\mathbf{k}z,\mathbf{pp}')=\big(\delta f^a(\mathbf{kp})|LQ(z-QLQ)^{-1}QL|\delta f^b(\mathbf{kp}')\big)$$

$$\times\big(n_b\Phi^b(p')\big)^{-1}. \tag{9}$$

В (9) L — оператор Лиувилля, Q — оператор, дополняющий проекционный оператор P, $Q+P=1$ [2]

$$P|g)=\sum_{a_1a_2}\int d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2$$

$$\times\sum_{\mathbf{k}}|\delta f^{a_1}(\mathbf{kp}_1))P_{a_1a_2}(\mathbf{k},\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2)(\delta f^{a_2}(\mathbf{kp}_2)|g),$$

$$P_{a_1a_2}(\mathbf{k},\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2)=\delta_{a_2a_1}\delta(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2)\big(n_{a_1}\Phi_{a_1}(p_1)\big)^{-1}$$

$$-\tilde{C}^{a_1a_2}(k)/n_{a_2}. \tag{9$'$}$$

Далее $\langle\ldots\rangle_0$ означает усреднение по равновесному распределению, $(\ |\ )$ есть $\langle\ldots\rangle_0/V$, $\tilde{C}^{ab}(k)$ — прямая корреляционная функция, связанная с $h^{ab}(k)$ соотношением Орнштейна–Цернике (см., например, [2])

$$C^{ab}(\mathbf{k},z;\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2)=\int_0^\infty dt e^{izt}\int d(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}C^{ab}(1,2t),$$

$$C^{ab}(1,2t)=\langle\delta f_1^a(t)\delta f_2^b(0)\rangle_0,$$

$$\delta f_1^a(t)=\sum_{i=1}^{N_a}\delta\big(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_{a_i}(t)\big)\delta\big(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_{a_i}(t)\big)-n_a\Phi^a(p_1). \tag{10}$$

Система уравнений для парных корреляционных функций $C_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)$ в матричной форме (7) в принципе позволяет найти данные функции и длинноволновые асимптотики корреляционных функций $C_{BB}(k,z)$ из (5). Для анализа $C_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)$ используются длинноволновые асимптотики матричных элементов $\Omega_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)$ (см. подробнее, например, [2]; $v_a=(k_BT/m_a)^{1/2}$)

$$\Omega_{11}^{ab}(\mathbf{k}z)=0,\quad \Omega_{12}^{ab}(\mathbf{k}z)=kv_a\delta_{ab},\quad \Omega_{15}^{ab}(\mathbf{k}z)=0,$$

$$\Omega_{21}^{ab}(\mathbf{k}z)=kv_a[\delta_{ab}-(n_a/n_b)^{1/2}\tilde{C}^{ab}(k)],$$

$$\Omega_{22}^{ab}(\mathbf{k}z)=-i[\nu_{22}^{ab}(z)+k^2D_l^{ab}(kz)],$$

$$\Omega_{33(44)}^{ab}(\mathbf{k}z)=-i[\nu_\perp^{ab}(z)+k^2D_\perp^{ab}(kz)],$$

$$\Omega_{25}^{ab}(\mathbf{k}z)=kD_{25}^{ab}(kz),\quad \Omega_{51}^{ab}(\mathbf{k}z)=0,$$

$$\Omega_{52}^{ab}(\mathbf{k}z)=kD_{52}^{ab}(kz),$$

$$\Omega_{55}^{ab}(\mathbf{k}z)=-i[\nu_{55}^{ab}(z)+k^2D_5^{ab}(kz)]. \tag{11}$$

Коэффициенты ν, D в (11) остаются конечными в длинноволновом пределе и при $z\to 0$.

4. В предыдущем разделе определена система уравнений (7) (и соотношения (8)–(11)) для парных корреляционных функций, длинноволновые и низкочастотные пределы которых определяют как обычные кинетические коэффициенты (см., например, [2]), так и линеаризованные барнеттовские кинетические коэффициенты из (6) [6–8]. Ниже получим выражения для длинноволновых асимптотик парных корреляционных функций $C_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)$, необходимых для расчета значений линеаризованных барнеттовских кинетических коэффициентов двухкомпонентных модельных кулоновских систем с классической статистикой (см., например, [3]) по (5). С этой целью рассмотрим решения линейной системы уравнений (7), которые имеют вид

$$C_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)=\Delta_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)/\Delta(\mathbf{k}z), \tag{12}$$

где $\Delta(\mathbf{k}z)$ — детерминант системы уравнений (7), $\Delta_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)$ — соответствующее алгебраическое дополнение. Прежде чем определить длинноволновые асимптотики $C_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)$ упростим систему (7), используя инвариантность относительно вращений равновесной функции распределения системы и, следовательно, функции $C^{ab}(\mathbf{k}z,\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2)$, которая представляет собой среднее по равновесной функции распределения. Поэтому функция $C^{ab}(\mathbf{k}z,\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2)$ может зависеть от трех векторов только через их инвариантные комбинации: $C^{ab}(\mathbf{k}z,\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2)=C^{ab}(z,\mathbf{k}^2,\mathbf{p}_1^2,\mathbf{p}_2^2,\mathbf{kp}_1,\mathbf{kp}_2,\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2)$, тогда и $C_{\mu\nu}^{ab}(\mathbf{k}z)$ становится равной нулю при условии $\mu=3,4(\nu=3,4)\neq\nu(\mu)$ и отлична от нуля в противоположном случае. Согласно тем же аргументам, остальные матрицы в (7) становятся равными нулю при условии $\mu=3,4(\nu=3,4)\neq\nu(\mu)$ и отличны от нуля в противоположном случае. Имеет место факторизация детерминанта $\Delta(\mathbf{k}z)$ из-за расцепления „поперечных“ компонент (*3, 4*) с „продольными“ компонентами (*1, 2, 5*):

$$\Delta(\mathbf{k}z)\approx\Delta_3(\mathbf{k}z)\Delta_4(\mathbf{k}z)\Delta_l(\mathbf{k}z). \tag{13}$$

Кинетические коэффициенты $\alpha_{\rho v}$ и $\beta_{v\rho}$ кулоновской системы (межчастичный потенциал [12,13] — $v^{ab}(r)=z_a z_b(e^2/r)(1-\exp(-r/\lambda_{ab}))$, $\lambda_{ab}=\hbar(2\pi m_e k_B T)^{1/2}$, z_a — зарядовое число, параметры системы σ и η взяты из [3,12], $a=(3/4\pi n)^{1/3}$, a_0 — радиус Бора, $2\eta=\beta_{vv}$ (6))

T,K	n_e, cm^{-3}	r_s, a/a_0	$\Gamma, e^2/k_B Ta$	$\alpha_{\rho v}$, m_e/a_0	σ, ω_p	$\beta_{v\rho}$, m_e/a_0	η, $m\omega_p n_e a^2$
$6.3\cdot10^5$	$1.6\cdot10^{24}$	1	0.5	-2.15	1.55	-1.2	1.04 ± 0.21
$1.6\cdot10^5$	$1.6\cdot10^{24}$	1	2	-0.54	1.2	-0.43	–

Тогда детерминант можно представить в виде

$$\Delta(\mathbf{k}z)=\prod_{i=1}^{m}(z-z_i). \tag{14}$$

Набор $\{z_i\}$ представляет собой корни уравнения $\Delta(\mathbf{k}z)=0$, $\{z_i\}$ (см., например, [2]) в длинноволновом пределе имеет вид (выписаны только „продольные“ корни, ω_p — плазменная частота)

$$z^s_\pm=\pm\tilde{c}k-ik^2\tilde{\Gamma},$$

$$z_\pm=\omega_\pm+k^2\Gamma,\quad \omega_\pm=-(i/2)\nu_\pm\pm\left[\omega_p^2-(\nu_\pm/2)^2\right]^{1/2},$$

$$z_\varepsilon=-ik^2D_\varepsilon,$$

$$\tilde{z}_\varepsilon=-i(\nu_\varepsilon+k^2\tilde{D}_\varepsilon). \tag{15}$$

Здесь первая пара корней соответствует звуковым модам, вторая — релаксационным зарядовым модам. пятый корень связан с теплопроводностью и последний — с обменом энергией между компонентами. В (15) — $\tilde{c}$ — изоэнтропическая скорость звука, $\{\nu\}$ — частоты, Γ, D — квадратичные поправки. Форма (14) позволяет представить длинноволновой предел (12) как

$$C^{ab}_{\mu\nu}(\mathbf{k}z)\approx\sum_{i=1}^{m}\frac{a^{ab}_{\mu\nu,i}}{(z-z_i)}. \tag{16}$$

В этом случае задача определения длинноволновых пределов $C^{ab}_{\mu\nu}(\mathbf{k}z)$ сводится к определению $\{a_i\}$, используя известный набор $\{z_i\}$, который выписан выше.

Вычислим с помощью (12)–(16), по первой формуле из (5) линеаризованные барнеттовские кинетические коэффициенты, из (6) векторный „вязко-диффузионный“ ($\alpha_{\rho v}$) и тензорный „диффузионно-вязкий“ ($\beta_{v\rho}$) для двухкомпонентной кулоновской системы. Выпишем выражения для $\alpha_{\rho v}$ и $\beta_{v\rho}$:

$$\alpha_{\rho v}=\lim_{z\to0}\lim_{k\to0}Vk_BTJ_{\rho v}(k,z)C^{-1}_{VV}(k)\varepsilon(ik)^{-1}, \tag{17}$$

$$\beta_{v\rho}=\lim_{z\to0}\lim_{k\to0}Vk_BTJ_{v\rho}(k,z)C^{-1}_{\rho\rho}(k)$$
$$\times(\mu^\rho_\rho+4\pi e^2/k^2)^{-1}(ik)^{-1}(3\rho_m/2). \tag{18}$$

В (18) в правой части в скобках последнее слагаемое является основным для заряженных сред, при этом в длинноволновом пределе расходимость в (18) отсутствует из-за компенсации сомножителей ($C_{\rho\rho}(k)\sim k^2$), μ^ρ_ρ — производная химического потенциала. В (17), (18) корреляторы потоков удобно переписать через корреляторы плотностей, используя второе равенство в (2),

$$Vk_BTJ_{\rho v}(k,z)=-\frac{z^2}{k^2}C_{\rho v}(k,z),$$

$$Vk_BTJ_{v\rho}(k,z)=-\frac{z^2}{k^2}C_{v\rho}(k,z).$$

Выразим корреляционные функции плотностей через $C^{ab}_{\mu\nu}(kz)$ и $C^{ab}_{\mu\nu}(k)$ из (7)

$$C_{v\rho}(k,z)=\sum_{a,b}C^{ab}_{21}(k,z)\gamma_b(m_ak_BT)^{1/2}nm_e/\rho_m,$$

$$C_{\rho v}(k,z)=\sum_{a,b}C^{ab}_{12}(k,z)\gamma_a(m_bk_BT)^{1/2}nm_e/\rho_m. \tag{19}$$

Фурье-образы корреляционных функций $C_{\rho\rho}(k)$ и $C_{vv}(k)$ из (17), (18) аналогичным образом связаны с $C^{ab}_{\mu\nu}(k)$ из (8). В (19) $\gamma=\pm1$ в зависимости от знака заряда соответствующей компоненты. Для вычисления временных корреляторов в (19) найдены коэффициенты в разложении (16) $\{a_i\}$ сравнением решения (7) с данным разложением. Учтены члены, определяющие конечные значения кинетических коэффициентов $\sim k^3$ и выше, а также соответствующие порядки по z. Принята во внимание мнимая часть корреляционных функций $C_{\rho v}(k,z)$, $C_{v\rho}(k,z)$ и в (17) действительная часть диэлектрической проницаемости, значения элементов $\Omega^{ab}_{25}(kz)$, $\Omega^{ab}_{52}(kz)$, матрицы $\Omega^{ab}_{\mu\nu}(kz)$ предполагаются малыми. Необходимая для расчета векторного коэффициента $\alpha_{\rho v}$ мнимая часть $k^2D^{ab}_l(kz)$ из (11) взята в аппроксимации: $\operatorname{Im}D^{ab}_l\sim2v_a^2/\omega_{p,a}$ [11].

Значения кинетических коэффициентов $\alpha_{\rho v}$ и $\beta_{v\rho}$ приведены в таблице для модельной кулоновской системы, необходимые для расчетов термодинамические и динамические характеристики которой известны [2,3,12,13]. В таблице для сравнения представлены данные по электропроводности и вязкости для модельной кулоновской системы. Если экстраполировать соотношения между линейными и линеаризованными кинетическими коэффициентами на экспериментальную реализуемую кулоновскую систему (например, неидеальную плазму), то сравнения для данной системы показывают, что вклады в потоки массы (заряда) и импульса от обычных и линеаризованных барнеттовских кинетических коэффициентов, которые зависят от градиентов гидродинамических переменных, различны. В векторном потоке учет линеаризованных коэффициентов излишен, за исключением условий с очень резким изменением параметров, реализующихся, например, в ударной волне. В то же время в тензорном потоке вклады от обычных и линеаризованных кинетических коэффициентов сравнимы и в более мягких условиях. Кинетические коэффициенты „вязко-диффузионный" ($\alpha_{\rho v}$) и „диффузионно-вязкий" ($\beta_{v\rho}$) не связаны соотношением взаимности Онсагера, так как относятся к потокам различной тензорной размерности. Исследование пары других линеаризованных коэффициентов из (6) α_{qv} и β_{vq} может быть проведено аналогично.

Линеаризованные кинетические коэффициенты образуют матрицу коэффициентов при старших производных в системе уравнений сохранения в квадратичном приближении. Свойства этой матрицы не изучены феноменологическими методами (используя соотношения взаимности, устойчивость относительно диффузии и т. п.) в отличие от линейного случая. Данные свойства задаются, по существу, алгоритмом расчета линеаризованных коэффициентов, который не может быть проконтролирован независимо. Поэтому применение некорректного алгоритма может привести к неадекватным решениям соответствующих задач газо- и гидродинамики для плотных сред.

Таким образом, в работе реализован подход [6–8] на примере вычисления линеаризованных барнеттовских кинетических коэффициентов для неидеальной модельной кулоновской системы. Такой подход применим и для нейтральных плотных сред. Данные, полученные для неидеальной модельной системы, позволяют заключить, что линейные и барнеттовские кинетические коэффициенты при определенных условиях вносят в потоки вклады одного порядка. Заметим, что аналогичные выводы имеют место и для разреженных сред (см., например, [5,14]). Вычисление линеаризованных барнеттовских кинетических коэффициентов важно, поскольку линеаризованные коэффициенты определяют множители при старших производных в системе уравнений сохранения в квадратичном приближении. Использование такого приближения необходимо при исследовании ряда задач: распространения звука, структуры слабых ударных волн, термоконвекции и т. д.

Список литературы

[1] *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 416 с.

[2] *Pavlov G.A.* Transport processes in plasmas with strong Coulomb interaction. Amsterdam: Gordon&Breach, 2000. 200 p.

[3] *Hansen J.-P., McDonald I.R.* // Phys. Rev. A. 1981. Vol. 23. P. 2041.

[4] *Burnett D.* // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 39. P. 385; Vol. 40. P. 382. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М.: ИЛ, 1960. 511 с.

[5] *Галкин В.С., Жаров В.А.* // ПММ. 2001. Т. 65. Вып. 3. С. 467–476.

[6] *Павлов Г.А.* // ЖТФ. 2008. Т. 78. Вып. 6. С. 24–33.

[7] *Pavlov G.A.* // J. Phys. A: Math. Gen. 2003. Vol. 36. P. 6019.

[8] *Павлов Г.А.* // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 4. С. 152–155. *Pavlov G.A.* // J. Phys. A: Math. Theor. 2009. Vol. 42. P. 214 046.

[9] *Mori H.* // Progr. Theor. Phys. 1965. Vol. 34. P. 399.

[10] *Ichiyanagy M.J.* // J. Phys. Soc. Japan. 1986. Vol. 35. P. 2963.

[11] *Kugler A.* // J. Stat. Phys. 1973. Vol. 8. P. 107.

[12] *Sjogren L., Hansen J.-P., Pollock E.L.* // Phys. Rev. A. 1981. Vol. 24. P. 1544.

[13] *Deutsch C.* // Phys. Lett. A. 1977. Vol. 60. P. 317.

[14] *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Наука, 1976. 556 с.