ЭЛЕКТРОНИКА

УДК 530.1: 533.7: 539.6
ГРНТИ 29.35.15
DOI: 10.34680/2076-8052.2023.1(130).71-79
Специальность ВАК 1.3.8; 2.2.2

Научная статья

МЕТОД ТЕНЗОРНЫХ ПОЛЕЙ В ТЕОРИИ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ: ТЕОРИЯ ЛИНЕЙНОГО ОТКЛИКА

Майфат Д. А.[1], Зубков В. В.[2], Зубкова А. В.[3]

[1,2]Тверской государственный университет (Тверь, Россия)
[3]Тверской государственный технический университет (Тверь, Россия)

Аннотация Предложенный ранее метод тензорных полей применён к описанию неоднородной бинарной смеси. Введенные в работе детерминистические корреляционные функции совместного распределения компонент смеси могут быть выражены в терминах локальных тензорных полей, каждое из которых описывает неоднородность в распределении частиц только лишь определенного сорта. На основе предложенного метода решена задача линейного отклика модельной ионной системы на малое внешнее механическое возмущение. Показано, что для систем заряженных частиц, взаимодействующих только лишь посредством кулоновского поля, возмущение плотности сильно зависит от степени электронейтральности системы. Если такая система в целом электронейтральна, то возмущение плотности некоторой компоненты бинарной смеси определяется только лишь свойствами этой компоненты. В случае, когда температуры отдельных компонент различаются ситуация существенно меняется.

Ключевые слова: детерминистические кинетические уравнения, тензорные функции распределения, бинарные системы, линейный отклик

Для цитирования: Майфат Д. А., Зубков В. В., Зубкова А. В. Метод тензорных полей в теории бинарных смесей: теория линейного отклика // Вестник НовГУ. 2023. 1(130). 71-79. DOI: 10.34680/2076-8052.2023.1(130).71-79

Research Article

TENSOR FIELD METHOD IN THE THEORY OF BINARY MIXTURES: LINEAR RESPONSE THEORY

Mayfat D. A.[1], Zubkov V. V.[2], Zubkova A. V.[3]

[1,2]Tver State University (Tver, Russia)
[3]Tver State Technical University (Tver, Russia)

Abstract The previously proposed method of tensor fields is applied to the description of an inhomogeneous binary mixture. The deterministic correlation functions of the joint distribution of the mixture components introduced in this work can be expressed in terms of local tensor fields, each of which describes inhomogeneity in the distribution of particles of only a certain kind. The proposed method solves the problem of the linear response of the model ion system to a small external mechanical perturbation. It is shown that for systems of charged particles interacting only through the Coulomb field, the density perturbation strongly depends on the degree of electroneutrality of the system. If such a system as a whole is electrically neutral, the density perturbation of a binary mixture component is determined only by the properties of this component. In the case when the temperatures of individual components differ, the situation changes significantly.

Keywords: deterministic kinetic equations, tensor distribution functions, binary systems, linear response

For citation: Mayfat D. A., Zubkov V. V., Zubkova A. V. Tensor field method in the theory of binary mixtures: linear response theory **//** Vestnik NovSU. 2023. 1(130). 71-79. DOI: 10.34680/2076-8052.2023.1(130).71-79

Введение

В работе [1] предложен метод вычисления детерминистических функций распределения, основанный на разложении последних по тензорным функциям (полям), характеризующим ту или иную степень неоднородности в распределении частиц. На основе предложенного метода была рассмотрена задача линейного отклика и получено аналитическое выражение для реакции локальной плотности среды на малое внешнее механическое возмущение.

В настоящей работе предложенный ранее метод распространён на случай бинарных смесей. На примере модельной ионной системы была решена задача линейного отклика на внешнее механическое возмущение и получено аналитическое выражение, связывающее возмущение плотности среды с потенциалом внешнего поля.

Бинарные системы

В соответствии с методом, изложенным в работе [1], введём скалярные сглаженные поля для каждого сорта (компоненты) бинарной смеси:

$$f_A(\mathbf{r},\mathbf{p},t)=\frac{1}{\Delta}\int\limits_{\Delta(\mathbf{r})} d^3\xi\sum_{a=1}^{N_A}\delta\big(\mathbf{r}+\xi-\mathbf{r}_a(t)\big)\delta\big(\mathbf{p}-\mathbf{p}_a(t)\big).\ (1) f_A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t). \tag{1}$$

Здесь индекс A соответствует номеру (сорту) компоненты смеси, N_A – число частиц A-го сорта, $\Delta(\mathbf{r})$ – область с центром в точке $\mathbf{r}$, по которой производится сглаживание, а Δ – величина этой области.

Найдём уравнения, которым удовлетворяют скалярные поля (1). Для этого, следуя работе [1], продифференцируем (1) по времени и учтём уравнение движения

$$\dot{\mathbf{p}}_a=-\sum_{b\neq a}^{N_B}\frac{\partial U_{AB}\big(\mathbf{r}_a(t)-\mathbf{r}_b(t)\big)}{\partial\mathbf{r}_a}-\sum_{b\neq a}^{N_A}\frac{\partial U_{AA}\big(\mathbf{r}_a(t)-\mathbf{r}_b(t)\big)}{\partial\mathbf{r}_a}-\frac{\partial U_A^{ext}\big(\mathbf{r}_a(t)\big)}{\partial\mathbf{r}_a}. \tag{2}$$

В результате получим детерминистические кинетические уравнения для скалярного поля каждой компоненты:

$$\begin{gathered}\frac{\partial f_A(\mathbf{r},\mathbf{p},t)}{\partial t}+\frac{\mathbf{p}}{m_A}\frac{\partial f_A(\mathbf{r},\mathbf{p},t)}{\partial\mathbf{r}}=\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\int d^3\mathbf{R}\frac{\partial U_{AB}(\mathbf{R})}{\partial\mathbf{R}}\int d^3\mathbf{p}'F^{AB}(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t)+\\+\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\int d^3\mathbf{R}\frac{\partial U_{AA}(\mathbf{R})}{\partial\tilde{\mathbf{R}}}\int d^3\mathbf{p}'F^{AA}(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t)+\\+\sum_{n=0}^{\infty}\prod_{m=0}^{n}\frac{\partial Q_A^{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_n}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)}{\partial\mathbf{p}}\frac{\partial^{m+1}}{\partial\mathbf{r}\partial x^{\alpha_m}}\frac{U^{ext}(\mathbf{r})}{n!},\end{gathered} \tag{3}$$

в которых функция

$$\begin{gathered}F^{AB}(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t)=\frac{1}{\Delta^2}\int d^3\mathbf{r}'\int\limits_{\Delta(\mathbf{r})}d^3\xi'\int\limits_{\Delta(\mathbf{r})}d^3\xi\sum_{a=1}^{N_A}\sum_{b\neq a}^{N_B}\delta\big(\mathbf{r}+\xi-\mathbf{r}_a(t)\big)\delta\big(\mathbf{p}-\mathbf{p}_a(t)\big)\times\\\times\delta\big(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{R}+\xi-\xi'\big)\delta\big(\mathbf{r}'+\xi'-\mathbf{r}_b(t)\big)\delta\big(\mathbf{p}'-\mathbf{p}_b(t)\big)\end{gathered} \tag{4}$$

имеет смысл двухчастичной функции распределения [1], а

$$Q_A^{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_n}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)=\frac{1}{\Delta}\int\limits_{\Delta(\mathbf{r})}\prod_{k=0}^{n}\xi^{\alpha_k}d^3\xi\sum_{a=1}^{N_A}\delta(\mathbf{r}+\boldsymbol{\xi}-\mathbf{r}_a(t))\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_a(t)) \tag{5}$$

является тензорным полем *n*-го ранга, характеризующим степень неоднородности распределения частиц сорта *A* внутри объема сглаживания $\Delta(\boldsymbol{r})$. Функции распределения $F^{AB}(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',\mathrm{t})$ характеризуют корреляцию в расположении частиц разного сорта. Корреляция в нашем методе полностью обусловлена детерминистической динамикой, описываемой уравнением (2). Выражение для $F^{AA}(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',\mathrm{t})$ получается из формулы (4) заменой индекса B на A и соответствует корреляции в расположении частиц одного и того же типа A.

Представим корреляционные функции в терминах тензорных полей. Для этого разложим функцию Дирака в ряд по $\xi-\xi'$:

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{R}+\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\xi}')=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\prod_{k=1}^{n}\left(\xi^{\alpha_k}-\xi'^{\alpha_k}\right)\partial_{\alpha_k}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'-\mathbf{R}). \tag{6}$$

В этом случае функция распределения (4) примет следующий вид:

$$\begin{gathered}F^{AB}(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t)=\frac{1}{\Delta^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\prod_{k=1}^{n}\int\limits_{\Delta(\mathbf{r})}d^3\xi'\int\limits_{\Delta(\mathbf{r})}d^3\xi\sum_{a=1}^{N_A}\sum_{b\neq a}^{N_B}\delta(\mathbf{r}+\boldsymbol{\xi}-\mathbf{r}_a(t))\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_a(t))\times\\ \times\left(\xi^{\alpha_k}-\xi'^{\alpha_k}\right)\partial_{\alpha_k}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}+\boldsymbol{\xi}'-\mathbf{r}_b(t))\delta(\mathbf{p}'-\mathbf{p}_b(t)).\end{gathered} \tag{7}$$

Ограничиваясь в разложении по n первыми трёмя слагаемыми (n = 0, 1, 2), получим выражение для$F^{AB}(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',\mathrm{t})$ во втором приближении:

$$\begin{gathered}F^{AB}(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t)=f_A(\mathbf{r},\mathbf{p},t)f_B(\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t)+h_A^{\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)\partial_\alpha f_B(\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t)-\\ -f_A(\mathbf{r},\mathbf{p},t)\partial_\alpha h_B^{\alpha}(\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t)+\frac{1}{2}Q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)\partial_\alpha\partial_\beta f_B(\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t)-\\ -h_A^{\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)\partial_\alpha\partial_\beta h_B^{\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t)+\frac{1}{2}f_A(\mathbf{r},\mathbf{p},t)\partial_\alpha\partial_\beta Q_B^{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{R},\mathbf{p}',t).\end{gathered} \tag{8}$$

Здесь $h_A^{\alpha}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$ – векторное поле смещений частиц типа *A* относительно центра объема сглаживания $\Delta(\mathbf{r})$:

$$h_A^{\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)=\frac{1}{\Delta}\int\limits_{\Delta(\mathbf{r})}\sum_{a=1}^{N_A}\xi^{\alpha}\delta(\mathbf{r}+\boldsymbol{\xi}-\mathbf{r}_a(t))\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_a(t))d^3\boldsymbol{\xi}, \tag{9}$$

а $Q_A^{\alpha\beta}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$ – тензорное поле второго ранга

$$Q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{p},t)=\frac{1}{\Delta}\int\limits_{\Delta(\mathbf{r})}\sum_{a=1}^{N_A}\xi^{\alpha}\xi^{\beta}\delta(\mathbf{r}+\boldsymbol{\xi}-\mathbf{r}_a(t))\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_a(t))d^3\boldsymbol{\xi}, \tag{10}$$

являющееся аналогом квадрупольного момента.

Уравнение (3) незамкнуто, так как для поиска скалярного поля $f_A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$ требуется записать уравнения для тензорных полей более высокого ранга. Так как корреляционные функции (7), (8) выражаются через тензорные поля, то необходимо получить уравнения, которым удовлетворяют тензорные поля различного ранга. Для этого достаточно продифференцировать выражение для тензорного поля (5) по времени, что в конечном итоге с учётом использования уравнения движения (2) приведёт к детерминистическому интегро-дифференциальному уравнению. Каждое, полученное таким способом, уравнение для тензорного поля будет содержать бесконечно много слагаемых, содержащих тензорные поля всевозможных рангов [1]. Если ограничиться в описании тремя первыми тензорными полями (нулевого, первого и второго рангов), то для замыкания системы достаточно записать уравнение для скалярного поля (1) во втором приближении, для векторного поля (9) – в первом приближении, а для тензорного поля второго ранга (10) – в нулевом. Рассмотрением именно такого случая мы сейчас и займемся.

Уравнения для тензорных полей в равновесном случае

Рассмотрим систему интегро-дифференциальных уравнений во втором приближении в равновесном случае. Под равновесием будем понимать состояние, при котором частные производные по времени от тензорных полей много меньше остальных слагаемых кинетического уравнения. В этом случае производными по времени можно пренебречь и считать, что тензорные поля явно от времени не зависят.

Ограничиваясь в уравнении (3) тремя первыми слагаемыми в сумме по n и, используя (8), а также применяя метод разделения переменных

$$f_A(\mathbf{r},\mathbf{p})=n_A(\mathbf{r})g_A(\mathbf{p}^2),\ h_A^{\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{p})=\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})\kappa_A(\mathbf{p}^2),\ Q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{p})=q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})\eta_A(\mathbf{p}^2), \tag{11}$$

получим интегро-дифференциальное уравнение для равновесного скалярного поля $n_A(\mathbf{r})$ имеющего смысл концентрации частиц в объёме $\Delta(\mathbf{r})$ вблизи точки $\mathbf{r}$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial n_A(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}=&-\beta_A\int d^3\mathbf{r}'\frac{\partial U_{AB}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{\partial\mathbf{r}}\Big(n_A(\mathbf{r})n_B(\mathbf{r}')+\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})\partial_\alpha n_B(\mathbf{r}')-n_A(\mathbf{r})\partial_\alpha\mu_B^{\alpha}(\mathbf{r}')+\\&+\frac{1}{2}q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})\partial_\alpha\partial_\beta n_B(\mathbf{r}')-\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})\partial_\alpha\partial_\beta\mu_B^{\beta}(\mathbf{r}')+\frac{1}{2}n_A(\mathbf{r})\partial_\alpha\partial_\beta q_B^{\alpha\beta}(\mathbf{r}')\Big)-\\&-\beta_A\int d^3\mathbf{r}'\frac{\partial U_{AA}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{\partial\mathbf{r}'}\Big(n_A(\mathbf{r})n_A(\mathbf{r}')+\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})\partial_\alpha n_A(\mathbf{r}')-n_A(\mathbf{r})\partial_\alpha\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r}')+\\&+\frac{1}{2}q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})\partial_\alpha\partial_\beta n_A(\mathbf{r}')-\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})\partial_\alpha\partial_\beta\mu_A^{\beta}(\mathbf{r}')+\frac{1}{2}n_A(\mathbf{r})\partial_\alpha\partial_\beta q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r}')\Big)-\\&-\beta_A n_A(\mathbf{r})\frac{\partial U^{ext}(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}-\beta_A\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})\frac{\partial^2U^{ext}(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}\partial x^{\alpha}}-\beta_A q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})\frac{\partial^2U^{ext}(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}\partial x^{\alpha}\partial x^{\beta}}.\end{aligned}\tag{12}$$

Появление постоянной β_A обусловлено применением метода разделения переменных Фурье (11). Аналогичное уравнение можно записать для концентрации частиц сорта B, в котором появляется постоянная β_B, которая, вообще говоря, не обязательно совпадает с β_A [2]. Однако, руководствуясь общими соображениями, подтверждаемыми гиббсовской статистической механикой, в этой работе мы будем полагать, что $\beta_A = \beta_B = \beta$. Параметр β при этом имеет смысл обратной температуры.

Так как уравнения для $n_A(\mathbf{r})$ и $n_B(\mathbf{r})$ незамкнуты, то для решения системы необходимо записать уравнения для векторных полей $\mu_{\mathrm{A}}^{\alpha}(\mathbf{r})$ и $\mu_{\mathrm{B}}^{\alpha}(\mathbf{r})$, а также для тензорных полей второго ранга $\mathrm{q}_{\mathrm{A}}^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ и $\mathrm{q}_{\mathrm{B}}^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$. Действуя аналогично выводу уравнения (12), получим:

$$\begin{gathered}\frac{\partial\mu_{\mathrm{A}}^{\alpha}(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}=-\beta\int d^3\mathbf{r}'\frac{\partial U_{AB}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{\partial\mathbf{r}}\left(\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})n_B(\mathbf{r}')+q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})\partial_\beta n_B(\mathbf{r}')-\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})\partial_\beta\mu_B^{\beta}(\mathbf{r}')\right)-\\-\beta\int d^3\mathbf{r}'\frac{\partial U_{AA}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{\partial\mathbf{r}}\left(\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})n_A(\mathbf{r}')+q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})\partial_\beta n_A(\mathbf{r}')-\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})\partial_\beta\mu_A^{\beta}(\mathbf{r}')\right)-\\-\beta\mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})\frac{\partial U^{ext}(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}-\beta q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})\frac{\partial^2U^{ext}(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}\partial x^{\beta}},\end{gathered} \tag{13}$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial q_{\mathrm{A}}^{\alpha\beta}(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}=-\beta\int d^3\mathbf{r}'\frac{\partial U_{AB}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{\partial\mathbf{r}}q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})n_B(\mathbf{r}')-\\-\beta\int d^3\mathbf{r}'\frac{\partial U_{AA}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{\partial\mathbf{r}}q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})n_A(\mathbf{r}')-\beta q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})\frac{\partial U^{ext}(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}.\end{gathered} \tag{14}$$

Уравнения для частиц сорта B получаются из уравнений (12)-(14) заменой индекса A на индекс B.

Уравнение линейного отклика

Применим полученные уравнения (12)-(14) для решения задачи линейного отклика бинарной системы на внешнее механическое возмещение. Для этого представим тензорные поля (1),(9),(10) в виде суммы двух слагаемых, первое из которых отвечает объёмной фазе (bulk), а второе, являющееся малой добавкой, обусловлено включением внешнего поля:

$$n_A(\mathbf{r})=n_b^A+\varepsilon_A(\mathbf{r}),\ \mu_A^{\alpha}(\mathbf{r})=\chi_A^{\alpha}(\mathbf{r}),\ Q_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})=q_{b,A}^{\alpha\beta}+D_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r}). \tag{15}$$

В формулах (15) мы учли, что в однородном случае векторное поле $\chi_{b,\mathrm{A}}^{\alpha}=0$. Условию малости возмущения отвечают следующие неравенства: $\varepsilon_A(\mathbf{r})\ll n_b^{\mathrm{A}}$ и $D_{\mathrm{A}}^{\alpha\beta}(\mathbf{r})\ll q_{b,\mathrm{A}}^{\alpha\beta}$. Подставляя (15) в уравнения (12)-(14) и проводя преобразования аналогичные тем, что были выполнены в нашей предыдущей работе [1], получим:

$$\begin{gathered}\varepsilon_A(\mathbf{r})=-\beta\int d^3\mathbf{r}'U_{AB}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\left(n_b^A\varepsilon_B(\mathbf{r}')-n_b^A\partial_\alpha\chi_B^{\alpha}(\mathbf{r}')+\frac{1}{2}n_b^A\partial_\alpha\partial_\beta D_B^{\alpha\beta}(\mathbf{r}')\right)-\\-\beta\int d^3\mathbf{r}'U_{AA}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\left(n_b^A\varepsilon_A(\mathbf{r}')-n_b^A\partial_\alpha\chi_A^{\alpha}(\mathbf{r}')+\frac{1}{2}n_b^A\partial_\alpha\partial_\beta D_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r}')\right)-\beta n_b^AU_A^{ext}(\mathbf{r}),\end{gathered} \tag{16}$$

$$\chi_A^\alpha(\mathbf{r}) = -\beta q_{b,A}^{\alpha\beta}\int d^3\mathbf{r}' U_{AB}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\partial_\beta \varepsilon_B(\mathbf{r}') - \\ -\beta q_{b,A}^{\alpha\beta}\int d^3\mathbf{r}' U_{AA}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\partial_\beta \varepsilon_A(\mathbf{r}') - \beta q_{b,A}^{\alpha\beta}\frac{\partial U_A^{ext}(\mathbf{r})}{\partial x^\beta}, \tag{17}$$

$$D_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = -\beta q_{b,A}^{\alpha\beta}\int d^3\mathbf{r}' U_{AB}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\varepsilon_B(\mathbf{r}') - \\ -\beta q_{b,A}^{\alpha\beta}\int d^3\mathbf{r}' U_{AA}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\varepsilon_A(\mathbf{r}') - \beta q_{b,A}^{\alpha\beta} U^{ext}(\mathbf{r}). \tag{18}$$

Используя преобразование Фурье для (16)-(18) и учитывая равенство $\partial_\alpha \chi_A^\alpha(\mathbf{r}) = \partial_\alpha \partial_\beta D_A^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$, получим систему уравнений для Фурье-образов $\tilde{\varepsilon}_A(\mathbf{k})$ и $\tilde{\varepsilon}_B(\mathbf{k})$ возмущений концентраций:

$$\tilde{\varepsilon}_A(\mathbf{k}) = -\frac{\omega\left(1-\tau\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})-\lambda\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})\right)\tilde{U}_{AB}(\mathbf{k})\tilde{\varepsilon}_B(\mathbf{k})+\tilde{U}^{ext}(\mathbf{k})}{1+\omega\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})-\omega\tau\tilde{U}_{AB}^2(\mathbf{k})-\omega\lambda\tilde{U}_{AA}^2(\mathbf{k})}, \tag{19}$$

$$\tilde{\varepsilon}_B(\mathbf{k}) = -\frac{\nu\left(1-\tau\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})-\lambda\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})\right)\tilde{U}_{AB}(\mathbf{k})\tilde{\varepsilon}_A(\mathbf{k})+\tilde{U}^{ext}(\mathbf{k})}{1+\nu\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})-\nu\lambda\tilde{U}_{AB}^2(\mathbf{k})-\nu\tau\tilde{U}_{BB}^2(\mathbf{k})}. \tag{20}$$

Здесь $\lambda = \dfrac{\beta q_{b,A}^{\alpha\beta}}{2}k_\alpha k_\beta$, $\tau = \dfrac{\beta q_{b,B}^{\alpha\beta}}{2}k_\alpha k_\beta$, $\omega = \beta n_b^A$, $\nu = \beta n_b^B$, $\tilde{U}_{AB}(\mathbf{k})$ – Фурье-образ межчастичного потенциала взаимодействия. Поиск аналитического выражения для возмущений концентраций $\varepsilon_A(\mathbf{r})$ и $\varepsilon_B(\mathbf{r})$ по их Фурье-образам даже в случае простого (смотри, например, модель такого потенциала в [1]), физически обоснованного выражения для потенциала межчастичного взаимодействия не представляется возможным. Поэтому рассмотрим подробнее нулевое приближение, в котором $\lambda = 0$, $\tau = 0$.

Нулевое приближение

Из уравнений (19)-(20) в нулевом приближении следуют уравнения для $\tilde{\varepsilon}_A(\mathbf{k})$ и $\tilde{\varepsilon}_B(\mathbf{k})$:

$$\tilde{\varepsilon}_A(\mathbf{k}) = -\omega\tilde{U}^{ext}(\mathbf{k})\frac{1+\nu\left(\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})-\tilde{U}_{AB}(\mathbf{k})\right)}{1+\omega\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})+\nu\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})+\omega\nu\left(\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})-\tilde{U}_{AB}^2(\mathbf{k})\right)}. \tag{21}$$

$$\tilde{\varepsilon}_B(\mathbf{k}) = -\nu\tilde{U}^{ext}(\mathbf{k})\frac{1+\omega\left(\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})-\tilde{U}_{AB}(\mathbf{k})\right)}{1+\omega\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})+\nu\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})+\omega\nu\left(\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})-\tilde{U}_{AB}^2(\mathbf{k})\right)}. \tag{22}$$

Применяя обратное преобразование Фурье, получаем выражения для возмущений концентраций $\varepsilon_A(\mathbf{r})$ и $\varepsilon_B(\mathbf{r})$:

$$\varepsilon_A(\mathbf{r}) = -\omega U^{ext}(\mathbf{r}) + \omega\int d^3\mathbf{r}'\Re_A\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}';\beta,n_b^A,n_b^B\right)U^{ext}(\mathbf{r}'), \tag{23}$$

$$\varepsilon_B(\mathbf{r}) = -\nu U^{ext}(\mathbf{r}) + \nu\int d^3\mathbf{r}'\Re_B\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}';\beta,n_b^A,n_b^B\right)U^{ext}(\mathbf{r}'). \tag{24}$$

Здесь

$$\Re_A\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}';\beta,n_b^A,n_b^B\right)=\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{\omega\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})+\nu\tilde{U}_{AB}(\mathbf{k})+\omega\nu\left(\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})-\tilde{U}_{AB}^2(\mathbf{k})\right)}{1+\omega\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})+\nu\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})+\omega\nu\left(\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})-\tilde{U}_{AB}^2(\mathbf{k})\right)}e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}, \quad (25)$$

$$\Re_B\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}';\beta,n_b^A,n_b^B\right)=\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{\nu\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})+\omega\tilde{U}_{AB}(\mathbf{k})+\omega\nu\left(\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})-\tilde{U}_{AB}^2(\mathbf{k})\right)}{1+\omega\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})+\nu\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})+\omega\nu\left(\tilde{U}_{AA}(\mathbf{k})\tilde{U}_{BB}(\mathbf{k})-\tilde{U}_{AB}^2(\mathbf{k})\right)}e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}. \quad (26)$$

Решения (22)-(23) – это точные решения, записанные в квадратурах. Для дальнейшего анализа полученных решений рассмотрим в качестве модели бинарной смеси ионную систему, парный потенциал для которой определим как:

$$U_{AB}(r)=\frac{e_Ae_B}{r}+C\frac{e^{-\sigma r}}{4\pi r}. \quad (27)$$

Здесь e_A – это заряд частицы A-ой компоненты смеси. Тогда Фурье-образ имеет вид:

$$\tilde{U}_{AB}(\mathbf{k})=\frac{e_Ae_B}{4\pi k^2}+\frac{C}{k^2+\sigma^2}. \quad (28)$$

В этом случае ядро $\Re_A$ выражения (23) для возмущения концентрации $\varepsilon_A(\mathbf{r})$ A-го сорта частиц может быть представлено в виде

$$\begin{aligned}\Re_A\left(R;\beta,n_b^A,n_b^B\right)&=\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{Zk^2+M}{k^4+Sk^2+X}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}}=\\&=-\frac{2}{R}\frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{+\infty}\frac{Zk^2+M}{k^4+Sk^2+X}\sin(kR)\,dk,\end{aligned} \quad (29)$$

в котором $R=\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|$, $S=C\beta\left(n_b^A+n_b^B\right)+\sigma^2+\frac{\beta}{4\pi}\left(n_b^Ae_A^2+n_b^Be_B^2\right)$, $Z=C\beta\left(n_b^A+n_b^B\right)+\frac{\beta e_A}{4\pi}\left(n_b^Ae_A+n_b^Be_B\right)$, $M=\frac{1}{4\pi}\left(\beta\sigma^2e_A\left(n_b^Ae_A+n_b^Be_B\right)+C\beta^2n_b^An_b^B\left(e_A-e_B\right)^2\right)$, $X=\frac{1}{4\pi}\left(\beta\sigma^2\left(n_b^Ae_A^2+n_b^Be_B^2\right)+C\beta^2n_b^An_b^B\left(e_A-e_B\right)^2\right)$.

Интегрирование по k в выражении (29) приводит к окончательному выражению для ядра:

$$\Re_A\left(R;\beta,n_b^A,n_b^B\right)=-\frac{1}{R}\frac{1}{(2\pi)^2}\sum_{k_i}\frac{k_iZ+M}{2k_i+S}\left(\cos(k_iR)\left(\mathrm{Si}(k_iR)+\frac{\pi}{2}\right)-\sin(k_iR)\,\mathrm{Ci}(-k_iR)\right), \quad (30)$$

Здесь k_i – корни биквадратного уравнения $k^4+Sk^2+X=0$, $\mathrm{Si}(x)=\int_0^{+\infty}\frac{\sin(t)}{t}dt$, $\mathrm{Ci}(x)=\gamma+\ln(x)+\int_0^x\frac{\cos(t)-1}{t}dt$, γ – постоянная Эйлера-Маскерони. Соотношение $S^2-4X>0$ соответствует физически реализуемому случаю, при котором ядро (30) может быть записано в компактной форме

$$\Re_A\left(R;\beta,n_b^A,n_b^B\right)=\frac{1}{4\pi R\left(y_2^2-y_1^2\right)}\left(\left(Zy_1^2+M\right)e^{-y_1R}-\left(Zy_2^2+M\right)e^{-y_2R}\right), \qquad (31)$$

в которой $y_{1,2}=\sqrt{\dfrac{S\pm\sqrt{S^2-4X}}{2}}$. В аналогичной форме может быть записано ядро $\Re_B$.

Таким образом, выбор модели ионного флюида в виде (27) позволяет свести решение задачи о линейном отклике бинарной смеси на внешнее механическое воздействие просто к вычислению интеграла по $\mathbf{r}'$ в выражении (23). Следовательно, в методе тензорных полей задача решается в квадратурах.

В случае чисто кулоновского взаимодействия (C=0) решение задачи сильно упрощается и ядро (25) в таком случае имеет вид:

$$\Re_A\left(R;\beta,n_b^A,n_b^B\right)=\frac{\beta\alpha e_A}{4\pi R}e^{-\psi R}. \qquad (29)$$

Здесь $\alpha=\dfrac{1}{4\pi}\left(n_b^Ae_A+n_b^Be_B\right)$, $\psi=\sqrt{\dfrac{\beta}{4\pi}\left(n_b^Ae_A^2+n_b^Be_B^2\right)}$. В случае общей электронейтральности смеси, то есть тогда, когда $\alpha=0$, ядро (29) равняется нулю и, следовательно, распределение плотности определяется лишь первым слагаемом в формуле (23). Это значит, что для электронейтральной системы возмущение плотности некоторой компоненты A бинарной смеси определяется только лишь свойствами именно этой компоненты. Вместе с тем существует мнение [2], следующее из анализа дискретного характера столкновений, что температуры каждой из компонент смеси даже в равновесном случае различаются. Различие температур для отдельных компонент чисто кулоновской системы приводит к неравенству нулю ядра $\Re_A$ даже в случае электронейтральной смеси.

Обсуждение и заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Получены уравнения для тензорных полей, характеризующих ту или иную степень неоднородности в распределения частиц бинарной смеси. Каждое тензорное поле (5) определяет распределение частиц только определенного сорта A.

2. В предложенном методе неизбежно возникают корреляционные функции (4), (7), (8), имеющие чисто детерминистическую природу. Корреляционные функции полностью определяются тензорными полями.

3. На примере модели ионной системы решена в квадратурах задача линейного отклика на внешнее механическое воздействие. Полученные решения обобщают результаты работы [1].

4. Предложенный метод может быть использован для изучения свойств мягкой материи совместно с классическим методом функционала плотности [3].

Благодарности

Мы признательны профессору Захарову А. Ю. за плодотворное обсуждение ряда вопросов, касающихся результатов представленных исследований.

Список литературы

1. Зубков В. В., Майфат Д. А., Яшкин К. Ю. Метод тензорных полей в теории линейного отклика // Вестник НовГУ. 2022. 3(128). 21-25. DOI: 10.34680/2076-8052.2022.3(128).21-25

2. Лоскутов М. Ю. О неравенстве парциальных температур однородной смеси газов в состоянии термодинамического равновесия // Фундаментальная и прикладная математика. 2000. 15(6). 63-75.

3. Vrugt M., Löwen H., Wittkowski R. Classical dynamical density functional theory: from fundamentals to applications // Advances in Physics. 2020. 69(2). 121-247. DOI:10.1080/00018732.2020.1854965

References

1. Zubkov V. V., Mayfat D. A., Yashkin K. Y. Metod tenzornykh poley v teorii lineynogo otklika [Method of tensor fields in the theory of linear response]. Vestnik NovSU. 2022. 3(128). 21-25. DOI: 10.34680/2076-8052.2022.3 (128).21-25

2. Loskutov M. Yu. O neravenstve partsial'nykh temperatur odnorodnoy smesi gazov v sostoyanii termodinamicheskogo ravnovesiya [On the inequality of partial temperatures of a homogeneous mixture of gases in a state of thermodynamic equilibrium]. Fundamentalnaya i prikladnaya matematika // Fundamental and Applied Mathematics, 2000. 15(6). 63-75.

3. Vrugt M., Löwen H., Wittkowski R. Classical dynamical density functional theory: from fundamentals to applications // Advances in Physics. 2020. 69(2). 121-247. DOI: 10.1080/00018732.2020.1854965

Информация об авторах

Майфат Денис Александрович – студент, Тверской государственный университет (Тверь, Россия), ORCID: 0009-0005-2157-9394, mayfatina_of@mail.ru

Зубков Виктор Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент, Тверской государственный университет (Тверь, Россия), ORCID: 0000-0003-0745-7807, Zubkov.VV@tversu.ru

Зубкова Анна Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент, Тверской государственный технический университет (Тверь, Россия), ORCID: 0009-0002-4368-4783, petrenko.anya@mail.ru