

УДК: 536, 539.1

Власенко Т.С.¹, асп.,
Сисоєв В.М.², д.ф.м.н., проф.

T.S. Vlasenko¹, PhD student,
V.M. Sysoev², Dr. Sci., Prof.

Вплив зовнішніх факторів на структуру двокомпонентної системи в стаціонарному стані

Influence of external factors on the two- component system structure in the steady state

^{1,2}Київський національний університет імені
Тараса Шевченка,
01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
e-mail: sonychko@bigmir.net

^{1,2}Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: sonychko@bigmir.net

Основна ідея роботи полягає в теоретичному дослідженні впливу зовнішніх факторів на задану дво-компонентну рівноважну термодинамічну систему, що в результаті переходить до стаціонарного нерівноважного стану, який характеризується наявністю скалярних потоків. В рамках запропонованого підходу отримано систему інтегро-диференціальних рівнянь для парних кореляційних функцій, що співпадають з другими рівняннями ланцюжка Боголюбова - Борна - Грина - Кирквуда - Йвона (ББГКІ), але включає в себе різні ефективні температури. Така подібність дозволяє використання звичайних інтегро-диференціальних рівнянь для парної кореляційної функції для розрахунку структурних та термодинамічних властивостей такої системи з врахуванням ефективних температур, характерних для утвореної системи, що записуються через збурену (нерівноважну) функцію розподілу Максвелла за імпульсами. Отримані теоретичні результати порівняно з сучасними експериментальними дослідженнями впливу опромінення на електропровідність. Враховуючи малу кількість використаних припущень, результати є у гарній відповідності.

Ключові слова: ланцюжок ББГКІ, інтегро-диференціальні рівняння, стаціонарний нерівноважний стан, парна кореляційна функція, ефективна температура.

The main objective of the work is studying of external factors influence on a given two-component equilibrium thermodynamic system resulting in the system evolution to the nonequilibrium steady state characterized by the presence of scalar fluxes. Within the suggested approach system of integro-differential equations for the pair correlation function, that have the same form as second equations of Bogoliubov - Born - Green - Kirkwood - Yvon (BBGKY) chain, but include the different effective temperature, is obtained. Such a similiarity suggests that in order to calculate the structural and thermodynamic properties of the system one can use the usual integro-differential equations for pair correlation function accounting for effective temperatures characteristic to the system and expressed through the disturbed (nonequilibrium) Maxwellian momentum distribution function. Comparison of the obtained theoretical results with the recent experimental data on electroconductivity changes under the irradiation is conducted. Provided analysis shows good correspondence of the theoretical predictiond with experimental data in respect to minimal set of assumpuions used.

Key Words: BBGKY chain, integro-differential equation, stationary nonequilibrium state, the pair correlation function, effective temperature

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

На сьогоднішній день швидкими темпами розвивається фізика реакторів. Цікавим напрямком дослідження є розробка реакторів четвертого покоління, так званих рідкосольових реакторів (РСР). РСР – це атомні реактори, робочою речовиною яких є розплав радіоактивних солей. Тому вкрай важливим є

розуміння фізичних процесів, що відбуваються в рідинах під дією радіаційного випромінювання.

В роботі розглядається зовнішній вплив рівномірно розподілених у просторі зряджених частинок на двокомпонентну рівноважну систему. В усіх випадках в системі порушується

розподіл Максвелла за швидкостями [1] і система намагається повернутися до рівноважного стану.

Відомо, що активні частинки вносять в таку систему від'ємну ентропію, яка компенсується виробництвом ентропії в самій системі [2-4]. Виникає важливе питання, як змінюються при цьому структурні характеристики системи, зокрема, парна функція розподілу.

Теоретична модель

Запишемо ланцюжок Боголюбова для просторово-часових функцій розподілу $F_n \vec{r}, \vec{p}, t$ [5]:

$$\frac{\partial F_n}{\partial t} \left(r_1^i, r_2^j, r_3^k, p_1^i, p_2^j, p_3^k, t \right) = \left[H^n, F_n \left(r_1^i, r_2^j, r_3^k, p_1^i, p_2^j, p_3^k, t \right) \right] + \rho \sum_{i=1}^n \int \frac{\partial \Phi \left(|r_i - r_{n+1}| \right)}{\partial r_i} \times \frac{\partial F_{n+1}}{\partial p_i} \left(r_1^i, r_2^j, r_3^k, p_1^i, p_2^j, p_3^k, t \right) dr_{n+1} dp_{n+1}, \quad (1)$$

де H^n - функція Гамільтона замкнутої системи з n частинок, $F_n \left(r_1^i, r_2^j, r_3^k, p_1^i, p_2^j, p_3^k, t \right)$ - нерівноважна потрійна функція розподілу, $\Phi \left(|r_i - r_{n+1}| \right)$ - потенціал взаємодії структурних елементів.

У якості модельної розглянемо двокомпонентну систему [6]. Такий вибір модельної системи можна легко узагальнити на багатокомпонентну систему, а однокомпонентна - це лише окремий випадок [7].

В загальному випадку для опису структурних характеристик систем достатньо знати парну функцію розподілу $F_2 \vec{r}_1, \vec{r}_2$, яка не залежить від часу. Отже, для широкого класу задач ми можемо обірвати ланцюжок (1) на другому рівнянні. Існує багато різних методів для визначення парної функції розподілу: експериментальні, теоретичні та методи комп'ютерного моделювання [8,9]. Однак, за допомогою більшості з них можна розрахувати цю функцію в рівноважному стані, тому ці методи не підходять для опису системи в стаціонарному нерівноважному стані. Метою даної роботи є визначення $F_2 \vec{r}_1, \vec{r}_2$ для деформованого розподілу в імпульсному просторі у результаті зовнішнього впливу на систему.

3 рівняння (1) друге рівняння ланцюжка Боголюбова для двокомпонентної системи в стаціонарному стані буде мати вигляд:

$$0 = \left(\frac{\partial \Phi \left(|r_1^i - r_2^j| \right)}{\partial r_1^i} \frac{\partial F_2 \left(r_1^i, r_2^j, p_1^i, p_2^j \right)}{\partial p_1^i} - \frac{p_1^i}{m_i} \frac{\partial F_2 \left(r_1^i, r_2^j, p_1^i, p_2^j \right)}{\partial r_1^i} \right) + \left(\frac{\partial \Phi \left(|r_1^i - r_2^j| \right)}{\partial r_2^j} \frac{\partial F_2 \left(r_1^i, r_2^j, p_1^i, p_2^j \right)}{\partial p_2^j} - \frac{p_2^j}{m_j} \frac{\partial F_2 \left(r_1^i, r_2^j, p_1^i, p_2^j \right)}{\partial r_2^j} \right) + \rho_k \sum_{i=1}^n \int_{i,j,k=1,2} \frac{\partial \Phi \left(|r_1^i - r_3^k| \right)}{\partial r_1^i} \times \frac{\partial F_3 \left(r_1^i, r_2^j, r_3^k, p_1^i, p_2^j, p_3^k \right)}{\partial p_1^i} dr_3^k dp_3^k + \rho_k \sum_{i=1}^n \int_{i,j,k=1,2} \frac{\partial \Phi \left(|r_2^j - r_3^k| \right)}{\partial r_2^j} \times \frac{\partial F_3 \left(r_1^i, r_2^j, r_3^k, p_1^i, p_2^j, p_3^k \right)}{\partial p_2^j} dr_3^k dp_3^k \quad (2)$$

де m_i - маса структурного елементу.

Дійсно, в стаціонарному випадку рівняння (2) перетворюється на суму двох рівнянь, за умови факторизації $F_2 \vec{r}, \vec{p} = g_2 \vec{r} f_2 \vec{p}$, кожне з яких являється рівнянням ланцюжка Боголюбова у випадку нерівноважного стану. Запишемо рівняння для однієї підсистеми:

$$0 = \left(\frac{\partial \Phi \left(|r_1^i - r_2^j| \right)}{\partial r_1^i} \frac{\partial f_2 \left(p_1^i, p_2^j \right)}{\partial p_1^i} g_2 \left(r_1^i, r_2^j \right) - \frac{p_1^i}{m_i} \frac{\partial g_2 \left(r_1^i, r_2^j \right)}{\partial r_1^i} f_2 \left(p_1^i, p_2^j \right) \right) + \rho_k \sum_{i=1}^n \int_{i,j,k=1,2} \frac{\partial \Phi \left(|r_1^i - r_3^k| \right)}{\partial r_1^i} \times \frac{\partial f_3 \left(p_1^i, p_2^j, p_3^k \right)}{\partial p_1^i} g_3 \left(r_1^i, r_2^j, r_3^k \right) dr_3^k dp_3^k \quad (3)$$

Інтегруючи (3) за p_1^i, p_2^j , отримаємо модифіковане рівняння БГКІ для випадку нерівноважного стаціонарного стану.

$$kT_{eff}^{ij} \frac{\partial g_2}{\partial r_1^i} \left(r_1^i, r_2^j \right) + \frac{\partial \Phi}{\partial r_1^i} \left| r_1^i - r_2^j \right| g_2 \left(r_1^i, r_2^j \right) + \rho_k \sum_{i=1}^n \int_{j,k=1,2} \frac{\partial \Phi}{\partial r_1^i} \left| r_1^i - r_3^k \right| g_3 \left(r_1^i, r_2^j, r_3^k \right) dr_3^k dp_3^k \quad (4)$$

kT_{eff}^{ij} визначається співвідношенням:

$$kT_{eff}^{ij} \int \frac{\partial f_2}{\partial p_1^i} \left(p_1^i, p_2^j \right) \partial p_1^i \partial p_2^j = - \int \frac{p_1^i}{m_i} f_2 \left(p_1^i, p_2^j \right) \partial p_1^i \partial p_2^j \quad (5)$$

З (5) можна визначити ефективні температури системи в загальному випадку.

Експериментальне підтвердження

В цій роботі ми зосередили увагу на електричних властивостях рідин, а саме на електропровідності, що залежить від миттєвої структури рідини [10]. Припустимо, що стаціонарний нерівноважний стан можна розглядати як нескінченну послідовність подібних миттєвих структур.

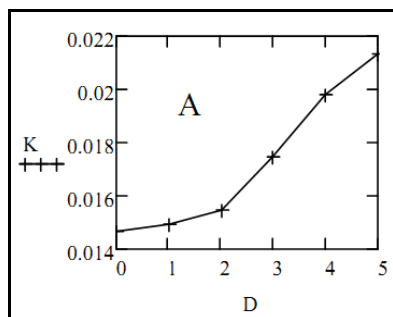


Рис. 1. Залежність питомої електропровідності розчину КСІ 0,001 М від дози γ -опроміювання [11].

З рис.1 видно, що питома електропровідність КСІ концентрацією 0,01М до опромінення становила $K_0 = 0,15 \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$ (з урахуванням лінійної концентраційної залежності питомої електропровідності), що відповідає температурі (Табл.1) $T_0 = 301\text{К}$, після опромінення $K = 0,215 \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$ (з урахуванням лінійної концентраційної залежності питомої електропровідності), що відповідає температурі нерівноважної системи (Табл.1) $T = 323\text{К}$. Таким чином, для розбавленого розчину КСІ концентрацією

0,001М ефективна температура буде дорівнювати $kT_{eff} \approx 1,07\text{кТ}$.

Таблиця 1

Температурна залежність питомої електропровідності для розчину КСІ концентрацією 0,01М [12]

T	K	T	K	T	K
°C	$\text{Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$	°C	$\text{Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$	°C	$\text{Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$
28	0,1496	38	0,1783	48	0,2073
30	0,1552	40	0,1841	50	0,2131
32	0,1609	42	0,1899	52	0,2189
34	0,1667	44	0,1957	54	0,2247
36	0,1725	46	0,2015		

Аналогічно для концентрованого розчину КСІ концентрацією 1,2М з експериментальних даних ($K_0 = 10,784 \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$ до опром., $K = 10,542 \text{ Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$ після опром. [11]) ефективна температура буде дорівнювати $kT_{eff} \approx 1,005\text{кТ}$.

З отриманих результатів бачимо, що у випадку розбавлених розчинів ефективна температура більш суттєво відрізняється від вимірювальної температури системи у порівнянні з концентрованим розчином. Відповідно, в рамках запропонованого підходу можна сказати, що зміни миттєвої структури є більшими для системи з меншою концентрацією.

Така якісна картина відповідає фізичним процесам, що проходять у системі. Так за однакових доз радіаційного опромінення кількість частинок зі зміненими швидкостями буде близькою за різних концентрацій. Загальна ж кількість частинок, які враховуються в розподілі за швидкостями, буде більшою. Відповідно вплив частинок зі зміненими швидкостями на загальний розподіл буде меншим для систем з більшою концентрацією.

Висновки

Отримані результати свідчать про те, що зміна термодинамічних властивостей двокомпонентної системи під дією зовнішніх факторів відбувається в результаті відхилення функції розподілу за імпульсами від максвелівського розподілу, що в свою чергу, призводить до зміни структурних характеристик. При цьому в двокомпонентній системі виникає декілька ефективних температур, що можна пояснити різною дією зовнішнього поля на функції розподілу по імпульсах підсистем.

Для випадку розбавлених розчинів ефективна температура більш суттєво відрізняється від вимірювальної температури системи у порівнянні з концентрованим розчином.

Список використаних джерел

References

1. *Kolesnichenko Ya.I.* Distribution Function For Nuclear Fusion Reaction Products In A Stationary Thermonuclear Reactor/ Ya.I. Kolesnichenko // *Nuclear Fusion*. –1975. – Vol. 15. – P. 35 – 37.
2. *Perez-Madrid A.* Nonequilibrium entropy. Characterization of stationary states/ A. Perez-Madrid // *Energy*. –2007. –Vol.32. –P.301–305.
3. *David Ruelle* Extending the definition of entropy to nonequilibrium steady states/ David Ruelle // *Proc Natl Acad Sci USA*. – 2003. – Vol.100. – P.3054–3058.
4. *Giovanni Gallavotti* Entropy production and thermodynamics of nonequilibrium stationary states: A point of view / Giovanni Gallavotti // *CHAOS*. – 2004. – Vol.14, No 3. – P. 680–690.
5. *Гуров К.П.* Основание кинетической теории (метод Боголюбова) / К.П. Гуров. – Москва: Наука, 1966. – 352с.
6. *Власенко Т.С.* Влияние внешнего воздействия на парную функцию распределения в стационарном состоянии/ Т.С. Власенко // *Письма в ЖЕТФ*. – 2014. – Т. 99, Вып. 5. – С. 311-313.
7. *Власенко Т.С.* Зміна структурних характеристик рідинної системи під дією опромінення./ Т.С. Власенко, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сисоєв // *Вісник Київського Національного Університету Імені Тараса Шевченка*. – 2013. - №2.- С. 287-291.
8. *Sozzi C.* Measurements of Electron Velocity Distribution Function // *AIP Conf. Proc.*- 2008.- V.98, No 73.- P. 1-8.
9. *Журавлёв В.М.* Модели эволюции распределения частиц по энергии в пространстве скоростей/ В.М. Журавлёв, А.В. Орищенко и др. // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*.- 2009.- №1.- С.121-126.
10. *Фишер И.З.* Статистическая теория гидкостей / И.З. Фишер – Москва: Государственное издательство физико-математической литературы, 1961.- 280с.
11. *Танасюк Д.А.* Роль структуры растворов электролитов при гамма-облучении и ее влияние на электропроводность и pH растворов/ Д.А. Танасюк, С.П. Магомедбеков и др.// *Электронный научный журнал "Исследовано в России"*. – 2010. – Т.61. – С. 798-814.
12. *Измайлов Н.А.* Электрохимия растворов / Н.А. Измайлов. – Москва: Химия, 1966. – 576 с.
1. *KOLESNICHENKO, Ya.I.* (1975) Distribution Function For Nuclear Fusion Reaction Products In A Stationary Thermonuclear Reactor. *Nuclear Fusion*. 15. p. 35 – 37.
2. *PEREZ-MADRID, A.* (2007) Nonequilibrium entropy. Characterization of stationary states. *Energy*. 32. p.301–305.
3. *DAVID RUELLE* (2003) Extending the definition of entropy to nonequilibrium steady states. *Proc Natl Acad Sci USA*. 100. p.3054–3058.
4. *GIOVANNI GALLAVOTTI* (2004) Entropy production and thermodynamics of nonequilibrium stationary states: A point of view. *CHAOS*. 14(3). p. 680–690.
5. *GUROV K.P.* (1966) *The basis of the kinetic theory (Bogolyubov's method)*. Moscow: Nauka.
6. *VLASENKO, T.S.* (2014) Effect of an External Action on a Pair Distribution Function in a Steady State . *JETP Letters*. 99(5). p. 311-313.
7. *VLASENKO, T., GAVRYUSHENKO, D., SYSOEV, V.* (2013) The structural characteristics changes of liquid systems under the irradiation. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv*. 2. p. 287-291.
8. *SOZZI, C.* (2008) Measurements of Electron Velocity Distribution Function *AIP Conf. Proc.* 98 (73). p. 1-8.
9. *ZHURAVLEV, V., ORISCHENKO, A. AND OTHERS.* (2009) Models of evolution of the particle distribution in energy in the velocity space. *News of higher educational institutions. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 1. p.121-126.
10. *FISHER, I.* (1961) *Liquids statistical theory*. Moscow: Gosudarstvennoe izdanie fiziko-matematicheskoi literatury.
11. *TANASJUK, D., MAGOMEDBEKOV, E. AND OTHERS.* (2010) Role structure of electrolyte solutions with gamma irradiation and its effect on the electrical conductivity and pH of the solutions . *Electronic scientific journal "Investigated in Russia"*. 61. p. 798-814.
12. *IZMAILOV N.* (1966) *Elektrical chemistry of solutions*. Moscow: Himiya.

Надійшла до редколегії 09.09.2014