УДК 532.132

ГАЗОКИНЕТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДИФФУЗИИ В РАСТВОРАХ КВАНТОВЫХ ЖИДКОСТЕЙ

К.Э. Немченко

Харьковский государственный университет,
Украина, 310077,
Харьков, пл. Свободы, 4

Вычислены коэффициенты диффузии многокомпонентных газов частиц с произвольными законами дисперсии и статистикой. Из общего решения найдены выражения для коэффициентов диффузии в предельном случае полного равновесия внутри компонент смеси. Полученные результаты используются при исследовании диффузионных процессов в сверхтекучих растворах квантовых жидкостей.

Одной из основных задач физической кинетики является вычисление коэффициентов диффузии в многокомпонентных газовых смесях [1]. Для получения коэффициентов диффузии необходимо решить систему кинетических уравнений для функций распределения частиц компонентов смеси. Точное решение поставленной задачи было возможно только в предельных случаях полного равновесия внутри компонентов смеси или отсутствия взаимодействия между частицами диффундирующего компонента [2].

Целью настоящей работы является получение точного, компактного выражения для коэффициентов диффузии, содержащего известные предельные случаи и позволяющего описывать как классические газы, так и растворы квантовых жидкостей в квазичастичной модели. Также будут определены условия, при которых реализуется те или иные предельные случаи. Полученные результаты будут использованы при исследовании диффузионных процессов в сверхтекучих растворах изотопов гелия.

Коэффициенты диффузии в многокомпонентных газах определяются как коэффициенты пропорциональности между градиентами концентрации и скоростями диссипативных потоков компонентов :

$$\vec{U}_i = -\sum_{k=1}^{k=N} D_{ik}\nabla\left(\frac{n_k}{n}\right),\ (1 \le i,k \le N) \tag{1}$$

Здесь $n = \sum_k n_k$ – полное число частиц в единице объема, N – число компонентов смеси. В кинетической теории коэффициенты диффузии вычисляются исходя из системы кинетических уравнений для функций распределения квазичастиц, которые в стационарном режиме записываются в виде [3]:

$$|\varphi\rangle = \hat{I}|g\rangle, \tag{2}$$

где введены N – мерные векторы $|\varphi\rangle$ и $|g\rangle$, компоненты которых

$$\varphi_k = \vec{v}_k T\frac{\nabla n_k}{n_k},\ (1 \le k \le N) \tag{3}$$

а g_k определяет отклонение функции распределения f_k от их равновесного значения f_{0k}:

$$f_k = f_{0k} - f'_{0k} g_k. \tag{4}$$

Здесь f'_{0k} — производная функции f_{0k} по энергии. Компоненты матрицы

$$\hat{I} = \hat{S} + \hat{J} \tag{5}$$

определяются интегральными операторами столкновений частиц одинакового типа

$$S_{km} = I_{kk}\delta_{km}, \ (1 \le k, m \le N) \tag{6}$$

и разных типов

$$J_{km} = \delta_{km}\sum_{m=1}^{m=N} I_{km} + (1-\delta_{km})I_{km} \,. \tag{7}$$

В N — мерном пространстве векторов вводится скалярное произведение

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{k=N}{}_1\langle\Phi_k|\Psi_k\rangle_1 = -\sum_{k=1}^{k=N}\int \Phi_k^*(\vec{p}_k)\Psi_k(\vec{p}_k)f'_{0k}\,d\Gamma_k \,. \tag{8}$$

Решение уравнения (2) может быть записано в формальном виде

$$|g\rangle = I^{-1}|\varphi\rangle, \tag{9}$$

Отсюда для скорости диссипативного потока k -го компонента получим

$$U_k = \frac{1}{\rho_k}\langle\vec{p}_k\,|\,g\rangle, \tag{10}$$

где r_k — плотность k — го компонента. Из (3) и (9) после сравнения выражения (10) с определением (1) коэффициентов диффузии D_{ik} получаем

$$D_{ik} = \frac{nT}{\rho_i\rho_k}\langle p_{iz}\,|\hat{I}^{-1}|\,p_{kz}\rangle \,. \tag{11}$$

Это выражение является формальным ввиду того, что еще не определена матрица $\hat{I}^{-1}$. Для этого необходимо выделить подпространство собственных векторов матрицы $\hat{I}$, которые обладают нулевыми собственными значениями:

$$\hat{I}|\Phi\rangle = 0\,. \tag{12}$$

Такие векторы соответствуют инвариантам столкновений — энергии, полному импульсу, числу частиц. В данной задаче, учитывая, что функции, определяющие бра — и кет — векторы в (11) являются векторами в обычном пространстве и выбирая направление градиентов концентраций вдоль оси z можно учитывать только одну сохраняющуюся величину — z-й компонент импульса. Компонент вектора $|G\rangle$ в N — мерном пространстве, соответствующий сохранению полного импульса имеет вид:

$$G_i = \rho^{-1}p_{iz}, \tag{13}$$

где $\rho = \sum_k \rho_k$ — полная плотность смеси. Для обращения матрицы $\hat{I}$ необходимо спроектировать ее на подпространство ортогональное вектору $|G\rangle$:

$$\hat{I}^{-1} \to P_n\left(P_n\hat{I}P_n\right)^{-1}P_n, \tag{14}$$

где $P_n = 1 - P_c$, а $P_c = |G\rangle\langle G|$ — оператор-проектор на подпространство инвариантов столкновений. В итоге получаем окончательное выражение для коэффициентов диффузии D_{ik}:

$$D_{ik} = -\frac{nT}{\rho_i\rho_k}\langle p_{iz}\,|P_n\left(P_n\hat{I}P_n\right)^{-1}P_n|\,p_{iz}\rangle\,. \tag{15}$$

Для того, чтобы получить матричные элементы (15) в явном виде введем ортонормированный набор векторов [1], который является базисом в пространстве, ортогональном $|G\rangle$:

$$\left|\varphi^{(1)}\right\rangle, \left|\varphi^{(2)}\right\rangle, \dots \left|\varphi^{(n)}\right\rangle, \dots \qquad (16)$$

В этих векторах k-тый компонент $(1 \le k \le N)$ n – того вектора $\left|\varphi^{(n)}\right\rangle$ имеет вид

$$\varphi_k^{(n-1)} = f_n(p_k) p_{kz}, \qquad (17)$$

где $f_n(p_k)$ – полином, порядок которого равен целой части числа $^{(k+n)}/_{n}$. При этом первые N векторов $\left|\varphi^{(n)}\right\rangle$, компоненты которых пропорциональны первой степени импульса обладают следующим свойством:

$$\hat{S}\left|\varphi^{(n)}\right\rangle = 0, \ (1 \le n \le N). \qquad (18)$$

Это позволяет упростить выражение для D_{ik}:

$$D_{ik} = -\frac{nT}{\rho_i \rho_k} \sum_{l,m=1}^{l,m=N} {}_1\left\langle p_{iz} \middle| \varphi_i^{(l)} \right\rangle_1 \left(\tilde{I}^{-1}\right)_{lm1} \left\langle \varphi_k^m \middle| p_{kz} \right\rangle_1 . \qquad (19)$$

Здесь введена матрица $\tilde{I}$ с элементами

$$\tilde{I}_{lm} = \left\langle \varphi_k \middle| \hat{I} \middle| \varphi_m \right\rangle, \qquad (20)$$

которую удобно записать в виде

$$\tilde{I} = -\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & C \end{pmatrix}, \qquad (21)$$

где

$$A_{lm} = -\left\langle \varphi^{(l)} \middle| \hat{I} \middle| \varphi^{(m)} \right\rangle, \ (1 \le l, m \le N) \qquad (22)$$

$$B_{lm} = -\left\langle \varphi^{(l)} \middle| \hat{I} \middle| \varphi^{(m)} \right\rangle, \quad (1 \le l \le N; m > N) \qquad (23)$$

$$C_{lm} = -\left\langle \varphi^{(l)} \middle| \hat{I} \middle| \varphi^{(m)} \right\rangle. \ (l, m > N) \qquad (24)$$

Отметим, что только матрица C содержит интегралы взаимодействия между частицами одинакового типа.

Выражение (21) – (24) позволяют переписать $\left(\tilde{I}\right)_{ik}^{-1}$ в следующем виде

$$\left(\tilde{I}^{-1}\right)_{ik} = -\left[\left(A - B^T C^{-1} B\right)^{-1}\right]_{ik}. \ (1 \le i, k \le N) \qquad (25)$$

Полученное выражение содержит бесконечномерные матрицы B и C, и поэтому не позволят получить явные аналитические выражения для D_{ik}. Однако, выражение (25) позволяет исследовать различные предельные случаи, доказать существование корректных интерполяционных формул, и определить условия применимости известных в настоящее время результатов.

Рассмотрим предельный случай быстрого установления равновесия внутри каждого из компонентов раствора, когда

$$S_{ik} >> J_{ik}. \qquad (26)$$

Тогда из общего выражения (25) получаем:

$$\left(\tilde{I}^{-1}\right)_{ik} = -\left[(A)^{-1}\right]_{ik}. \qquad (27)$$

Здесь, в отличие от (25), матрица $\hat{I}^{-1}$ содержит только конечномерную матрицу A, поэтому выражения (19), (27) фактически дают явное выражение для коэффициентов диффузии в многокомпонентных газах:

$$D_{ik} = \frac{nT}{\rho_i \rho_k} \sum_{n,l=1}^{n,l=N} {}_1\langle p_{iz} | \varphi^{(n)} \rangle_{1\,1} \langle \varphi^{(l)} | p_{kz} \rangle_1 \left(A^{-1}\right)_{nl} . \tag{28}$$

Этот результат, полученный для смесей классических газов, может быть использован для нахождения коэффициентов диффузии в растворах квантовых жидкостей когда справедливо квазичастичное описание. В этом случае необходимо каждому компоненту смеси поставить в соответствие определенный тип тепловых возбуждений — фононы, ротоны и квазичастицы ^{3}He — примесоны. Тогда различные матричные элементы матрицы A будут определять различные диссипативные коэффициенты описывающие диффузионные процессы в квантовых растворах: массовую диффузию [4], спиновую диффузию и термодиффузию [5], а также диффузионную часть коэффициента теплопроводности [6]. В частности выражение (28) позволяет найти коэффициент массовой диффузии сверхтекучих растворов ^{3}He-^{4}He во всей области температур, где применимо квазичастичное описание и при произвольных соотношениях между относительными концентрациями квазичастиц. На рис. 1 приведены экспериментальные данные [7,8] по коэффициенту массовой диффузии для низких температур ($T < 0.5$ K), где реализуется фонон — примесонная система квазичастиц и для высоких температур ($T > 1.4$ K), где существенны только ротоны и примесоны. Сплошная кривая представляет собой расчет по формуле (28) с учетом всех типов квазичастиц. На рис.2 сопоставляются теоретические расчеты с экспериментальными данными [8,9] по коэффициенту массовой диффузии для растворов, в которых концентрация

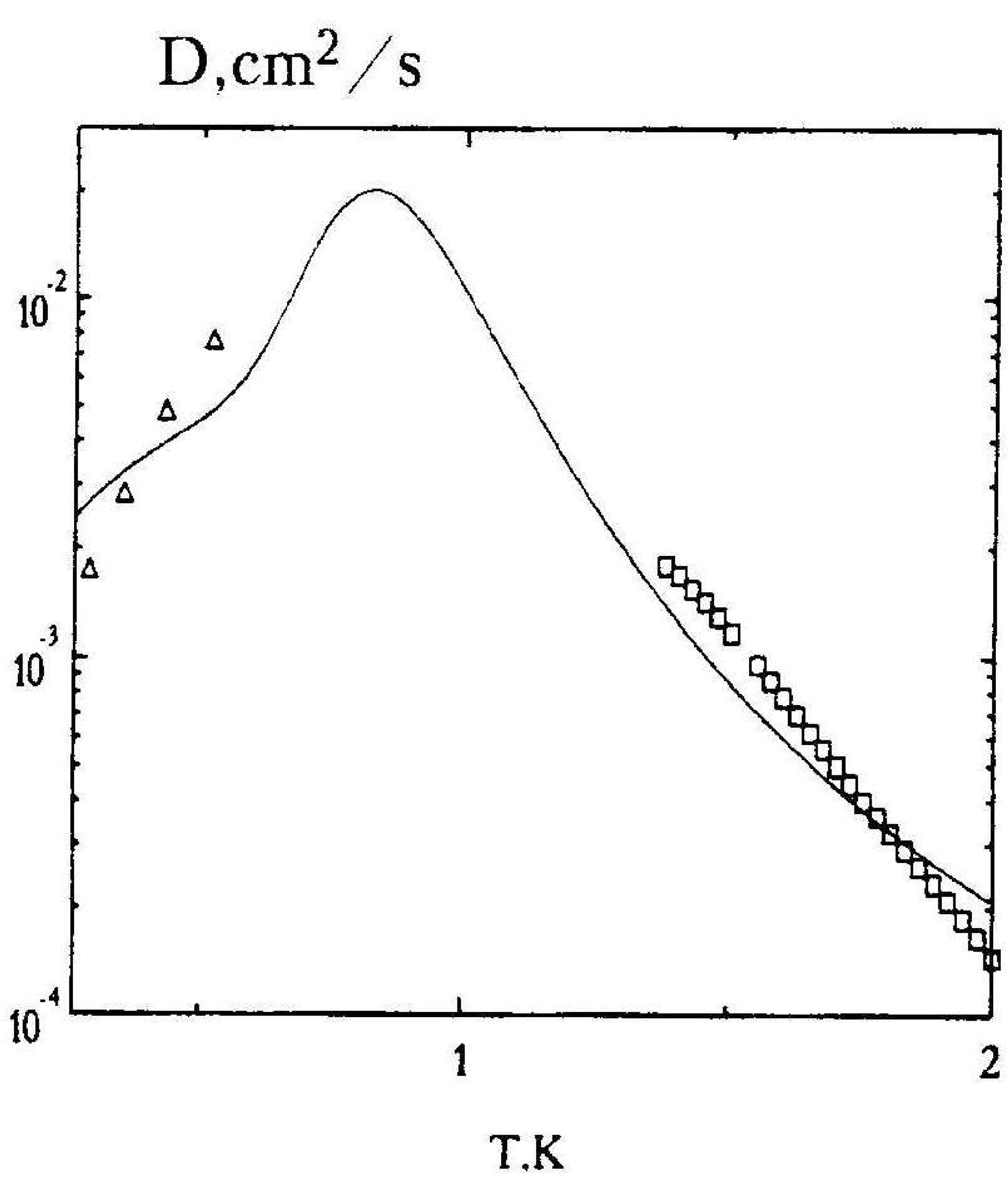

Рис.1. Температурная зависимость коэффициента массоrой диффузии сверхтекучих растворов ^{3}He-^{4}He с концентрациями: $x = 10^{-3}$ (□) [7], $x = 1.22\ 10^{-3}$ (Δ) [8]. Кривая соответствует расчетам по формуле (28) для концентрации $x = 10^{-3}$.

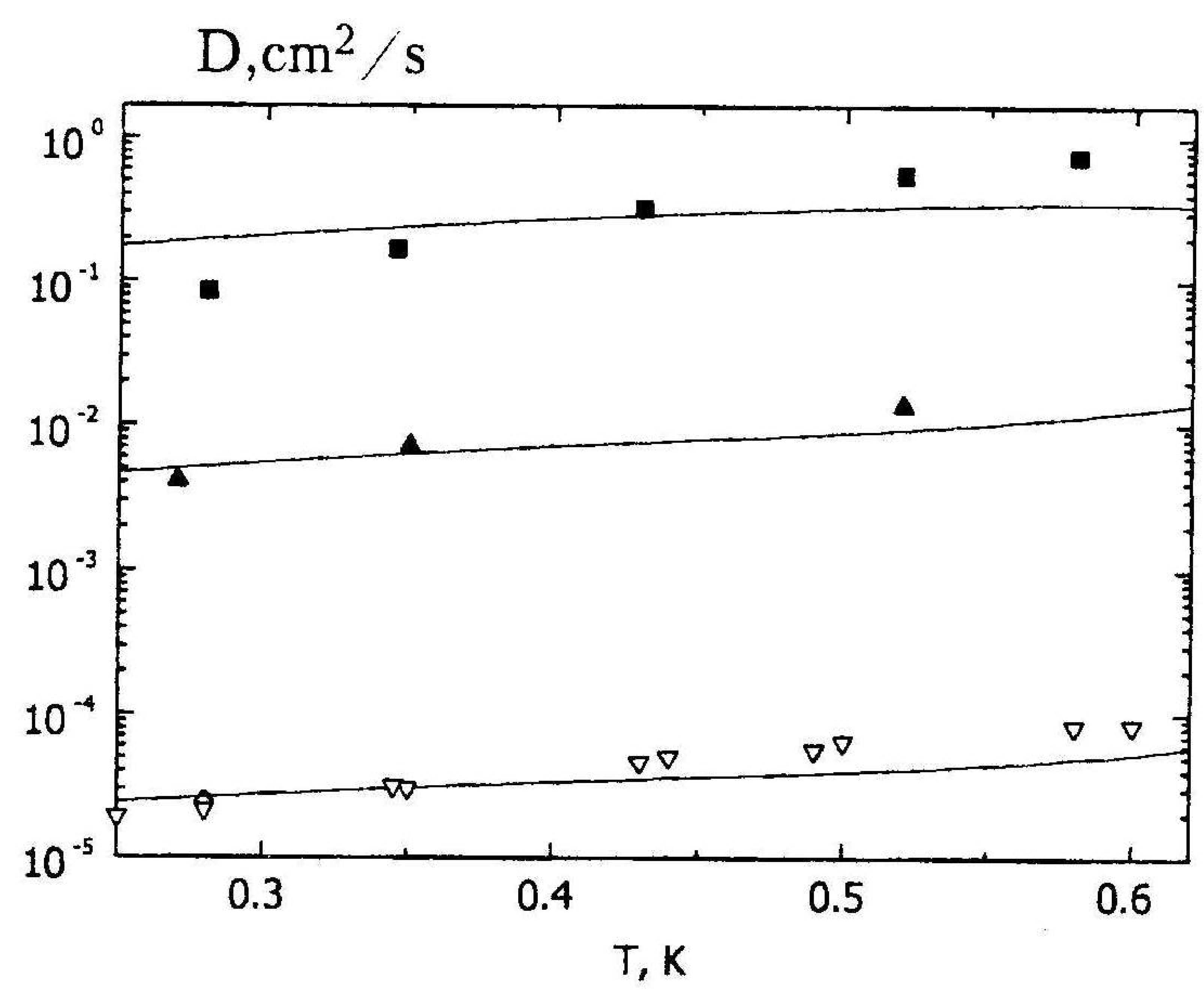

Рис.2. Температурная зависимость коэффициента массовой диффузии сверхтекучих растворов ^{3}He-^{4}He с различными концентрациями: $x = 1.1\ 10^{-4}$ (черный □) и $x = 7.1\ 10^{-4}$ (черный Δ)[8]; x=1.32 10^{-2} (∇, Δ) [9]. Кривые соответствует расчетам по формуле (28) для соответству-ющих концентраций.

не меняется в широких пределах от 0.01 % до 1 %. Приведенное на рисунках сопоставление теоретических расчетов с экспериментальными данными свидетельствует об удовлетворительном согласии рассчитанных и измеренных значений коэффициента массовой диффузии. Таким образом соотношение (28) полученное из общего результата для коэффициентов диффузии многокомпонентных газов описывает массовую диффузию сверхтекучих растворов ^{3}He-^{4}He в широких пределах изменения температуры и концентрации, охватывающих фактически всю область применимости квазичастичного описания.

Автор выражает глубокую благодарность И. Н. Адаменко за всестороннюю помощь при постановке и решении задачи, а также за плодотворные обсуждение полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Дж. Ферцигер, Г. Капер. Математическая теория процессов переноса в газах. Москва, Мир, 1976, 540 с.

[2] Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. Физическая кинетика. Москва, Наука, 1979, с. 240.

[3] И. Н. Адаменко, К. Э. Немченко, В. И. Цыганок. ЖЭТФ, 1989, **91**, с.731.

[4] I. N. Adamenko, K. E. Nemchenko, V. I. Tsyganok. J. Low Temp. Phys., 1992, **88**, p. 15.

[5] И. Н. Адаменко, К. Э. Немченко. ФНТ, 1995, **21**, с. 498.

[6] И. Н. Адаменко, К. Э. Немченко. ФНТ, 1996, **22**, с. 995.

[7] D. Murphy and H. Meyer. J. Low Temp. Phys.,1997,**107**,p. 175.

[8] R. L. Rosenbaum, J. Landau, and Y. E. Ekstein. J. Low Temp. Phys., 1974, **16**, p. 131.

[9] W. R. Abel and J. C. Wheatley. Phys. Rev. Lett., 1968, **21**, p. 1231.