

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМ. М. М. БОГОЛЮБОВА

Клюшніченко Олександр Вікторович

УДК 538.9

ІНДУКОВАНА ДИСИПАТИВНА ВЗАЄМОДІЯ ТА КОЛЕКТИВНЕ РОЗСІЯННЯ
В ЛЕНГМЮРОВОМУ ГРАТКОВОМУ ГАЗІ

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ – 2019

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті фізики НАН України.

Науковий керівник: член-кореспондент НАН України,
доктор фізико-математичних наук, професор,
Томчук Петро Михайлович,
Інститут фізики НАН України,
завідувач відділу теоретичної фізики

Офіційні опоненти: член-кореспондент НАН України,
доктор фізико-математичних наук, професор,
Іванов Борис Олексійович,
Інститут магнетизму НАН України та МОН України,
завідувач лабораторії магнітних матеріалів

член-кореспондент НАН України,
доктор фізико-математичних наук, професор,
Петров Ельмар Григорович,
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова
НАН України, завідувач відділу теорії квантових
процесів у наносистемах

Захист відбудеться « 27 » _____ червня _____ 2019 р. о 12³⁰ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01 Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України за адресою: вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03143, Україна.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України за адресою: вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03143, Україна.

Автореферат розісланий « 25 » _____ травня _____ 2019 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01,
доктор фізико-математичних наук

В. Є. Кузьмичев

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність роботи. Проходження частинок-домішок через середовище (газ, рідина, плазма і т. ін.) часто породжує довготривалі збурення-сліди, так само як розсіяння потоку частинок середовища на «важких» домішках супроводжується збуреннями асоційованого з середовищем поля. Значна просторова протяжність таких збурень-слідів обумовлює далекосяжні нерівноважні кореляції чи ефективну взаємодію між домішками, що призводить до їх колективної поведінки, зокрема, організації нерівноважних (дисипативних) структур. Характеристики самих збурень і властивості породженої ними ефективної нерівноважної взаємодії визначаються механізмом енерговтрат в системі домішка-середовище та властивостями самого середовища: його нелінійністю (наприклад, ефект блокади в газі), типом міжчастинкової взаємодії. Однією з особливостей індукованої нерівноважної взаємодії є її неньютонівський характер зумовлений дисипативними властивостями середовища, як, наприклад, в суто дифузійних системах. Ці властивості роблять такі системи цікавими як з точки зору наукових досліджень так і в плані їх практичних застосувань. Одна з основних цілей роботи — вивчити роль короткосяжної міжчастинкової взаємодії в газі та її вплив, зокрема через ефект блокади, на поведінку далекосяжних нерівноважних сил та кореляцій між домішками, а також на властивості нерівноважних структур і колективного розсіяння. У зв'язку з цим, в якості основної моделі середовища, в даній роботі використовується найпростіша модель багатокомпонентного Ленгмюрового ґраткового газу, який, з одного боку, являє собою суто дисипативну систему і, в той же час, враховує сильне короткосяжне міжчастинкове відштовхування, що може проявлятися як ефект блокади. В дисертаційній роботі, в рамках даної моделі були продемонстровані та вивчені ряд ефектів, що виникають при розсіянні потоку газу на ансамблі домішок та зумовлені ефектом блокади. Зокрема, ефекти інверсії сліду, перемикання знаку дисипативної взаємодії між домішками, її асимптотична поведінка, ефекти підсилення та зупинки ударної хвилі, підсилення колективного розсіяння, а також ефекти від'ємних кореляцій, від'ємного масоперенесення і стрибкоподібного характеру субдифузії в неоднорідних середовищах.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Робота виконувалась у відділі теоретичної фізики Інституту фізики НАН України. Дослідження, що складають зміст дисертації виконувались у рамках наступних бюджетних тем. У 2010–2011 рр.: 1.4.1. ВЦ/138 «Нанофізика квантоворозмірних та низьковимірних структур, у тому числі на поверхні твердого тіла, в металоорганічних, полімерних та рідкокристалічних системах, молекулярна наноелектроніка» (№ держ. реєст. 0107U002165), 1.4.1. В/133 «Оптичні та транспортні властивості нелінійних і просторово обмежених систем» (№ держ. реєст. 0107U002349); у 2012–2016 рр.: 1.4. В/161 «Явища переносу і дисипації в нелінійних та обмежених середовищах» (№ держ. реєст. 0112U003150), 1.4. ВЦ/156 «Дослідження конденсованих систем на нанометровому рівні з метою з'ясування розмірних фізичних ефектів, розроблення фізичних основ нових електронних і іонних технологій» (№ держ. реєст. 0112U002509); у 2017–2018 рр.: 1.4. В/183 «Релаксаційні та розмірні явища в лінійних та нелінійних середовищах» (№ держ. реєст. 0117U002613), 1.4. ВЦ/188 «Фундаментальні процеси, що визначають властивості новітніх фізичних об'єктів та ма-

теріалів для електроніки, оптоелектроніки, фотоніки та спінтроніки» (№ держ. реєст. 0117U002612).

Мета і завдання дослідження. Метою роботи було вивчити як короткосяжне відштовхування між частинками броунівського газу може впливати на форму, структуру слідів та на характер індукованої дисипативної взаємодії, опосередкованої ними, зокрема, через ефекти типу блокади. *Завдання* полягало в проведенні аналітичних та числових розрахунків у широкому діапазоні значень параметрів системи, виявленні нових особливостей поведінки, аномальних ефектів, та встановлення їх механізму.

Об'єктами дослідження є нерівноважні структури (дифузійні сліди) в газоподібних середовищах, процес їх формування, індукована дисипативна взаємодія, явище колективного розсіяння газу на випадково неоднорідних структурах, ефект блокади, ударні хвилі, система з термоактивованим стрибковим транспортом.

Предметом дослідження є: просторово-часові характеристики та структурні особливості дифузійних слідів, вплив короткосяжної міжчастинкової взаємодії (потенціал з жорстким кором) на властивості дифузійних слідів та індуковані дисипативні сили між включеннями, роль нелінійних ефектів в колективному розсіянні потоку газу на неоднорідностях та вплив ступеню неупорядкованості просторового розподілу розсіювачів на характеристики процесу розсіяння.

Методи дослідження. В роботі застосовувались як аналітичні методи, так і методи числового моделювання. Для того, щоб показати принципову можливість ряду кінетичних ефектів, було використано класичну модель Ленгмюрового граткового газу для двокомпонентної системи та її граничний випадок — Лоренців газ. Для отримання характерних асимптотик використовувався метод потенціалу простого шару (метод вторинних поверхневих джерел), інтегральні рівняння, спеціальні функції. Для числових розрахунків в рамках наближення локальної рівноваги використано аналог методу скінченних різниць. Для отримання часозалежної кореляційної функції швидкостей використовувались наближення однорідного кластера, адіабатне наближення (виключення швидкої змінної), метод моментів, теорія збурень. При дослідженні ефектів від'ємного масоперенесення використовувався числовий метод сіток для дифузійних рівнянь. Також використовувались методи згладжування для нерегулярних залежностей, генератор псевдовипадкових чисел, стандартні базові обчислювальні процедури.

Наукова новизна одержаних результатів.

В дисертаційній роботі отримано наступні результати:

1. Продемонстровано ефект інверсії сліду від включення в потоці газу з короткосяжним міжчастинковим відштовхуванням. На прикладі моделі граткового Ленгмюрового газу показано, що при збільшенні концентрації частинок газу нелінійний ефект блокади призводить до перемикання структури сліду, яка при цьому набуває нетипової форми з інвертованим профілем розподілу густини.
2. Показано безпосередній вплив блокади частинок газу на зміну знаку ефективної взаємодії між домішками, яка індукована розсіянням потоку газу, в залежності від його концентрації.
3. Показано, що у випадку ансамблю малих, далеко рознесених включень, дисипативна взаємодія має форму індукованої диполь-дипольної взаємодії, що опи-

сується анізотропним екранованим потенціалом типу кулонівського. Отримані аналітичні вирази якісно описують ефективну взаємодію між включеннями та пояснюють ефект її перемикавання як результат зміни напрямку анізотропії.

4. Показано, що нелінійний ефект блокади проявляється значно сильніше біля близько розташованих включень, про що свідчить додаткове екранування потоку газу та формування вираженого кінкового профілю розподілу густини.
5. Встановлено, що поведінка величини ефективної дисипативної взаємодії, в загальному випадку, не є монотонною в залежності як від концентрації газу так і від величини зовнішнього поля. Показано, що ці залежності мають характерні піки взаємодії, які відповідають режимам найбільш ефективного формування спільного збурення навколо пар включень.
6. Показано ряд особливостей колективного розсіяння при наявності нелінійного ефекту блокади в газі, а саме
 - розсіяння потоку газу суттєво підсилюється при гетерогенній фрагментації суцільного включення на кластер домішок;
 - амплітуда розсіяння на кластері з випадково неоднорідним розподілом домішок є значно більшою, порівняно з впорядкованим розподілом домішок; при цьому також спостерігається ефект підсилення і прискорення ударної хвилі;
 - в неадіабатному режимі формування збурення газу з профілем типу доменної стінки зумовлено ефектом зупинки ударної хвилі;
 - також показана наявність генерації кластером солітоноподібних структур типу лавин або передвісника.
7. Продемонстровано наявність індукованих від'ємних довгочасових кореляцій між частинками повільної підсистеми двокомпонентного ґраткового газу.
8. Показано, що релаксація густини в сильнеоднорідному середовищі може супроводжуватись від'ємним масоперенесенням. При дифузійному розпливанні пакета рух положення його фронту має стрибкоподібний характер, який описує стадійне проходження через області неоднорідності. Показано, що середньоквадратичне відхилення відображає лише усереднену динаміку руху фронту і задовольняє режиму субдифузії.

Практичне значення отриманих результатів. Робота має теоретичний характер. Ефекти інверсії сліду, перемикавання дисипативної взаємодії та дисипативного спарювання, виявлені в роботі, можуть бути визначальним фактором при формуванні дисипативних структур в ансамблі домішок в сильнеоднорідних конденсованих середовищах. Врахування отриманих результатів може сприяти виявленню нових важливих аспектів в задачах мікро- та макрореології. Якісне узгодження властивостей нерівноважних структур, отриманих в роботі, зі структурами, що спостерігаються в запорошеній плазмі та колоїдних суспензіях, дозволяє використовувати розвинені підходи та моделі для наближеного опису таких систем. Прямим застосуванням використаної моделі традиційно є опис направленої міграції адсорбованих атомів по поверхні твердого тіла (електроміграція) та нерівноважної поведінки суперйонних провідників, тому цікавим є питання можливості експериментального спостереження виявлених ефектів в цих системах.

Особистий внесок здобувача. Результати, включені до дисертаційної роботи, опубліковані в ряді наукових робіт у співавторстві. В усіх роботах дисертант прий-

мав безпосередню участь в постановці задачі, розробці методів її розв'язку, обговоренні, проведенні розрахунків, їх інтерпретації, формулюванні результатів та написанні статей. Всі результати чисельних розрахунків були отримані автором.

При виконанні роботи [1], здобувач звернув увагу на можливість ефекту локального «від'ємного» масоперенесення, що супроводжує дифузійний транспорт в сильнонеоднорідному середовищі, та виконав відповідні чисельні розрахунки.

В роботі [2] здобувач виконав аналітичні розрахунки та отримав вираз для кореляційної функції швидкостей.

В роботі [3] автору належать числові розрахунки розподілів густини, на основі яких продемонстровано ефект інверсії сліду та перемикання його асимптотик, а також порівняння аналітичних асимптотик з чисельними.

В роботі [4] здобувач, на основі числового моделювання динаміки середніх чисел заповнення, встановив можливість ефекту перемикання «притягання-відштовхування» індукованої дисипативної взаємодії між двома включеннями, як результат інверсії слідів включень. Автором було показано немонотонний характер дисипативної взаємодії в залежності від рівноважної концентрації газу і величини зовнішнього поля, а також запропоновано пояснення, що характерні піки цих залежностей пов'язані з формуванням спільного (колективного) збурення густини навколо пари включень. Також автор отримав аналітичні вирази для збурення густини та індукованої дисипативної сили методом вторинних поверхневих джерел.

В роботі [5] ефект посиленого розсіяння на просторово обмежених, випадково неоднорідних кластерах домішок було виявлено здобувачем на основі власних чисельних розрахунків. Можливість генерації кластером домішок одиноких солітоноподібних структур типу лавини також була показана автором.

Апробація результатів роботи. Матеріали роботи було представлено на семінарах відділу теоретичної фізики Інституту фізики НАН України та відділу синергетики Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, 42-й підсумковій науковій конференції Інституту фізики НАН України в 2017 році. Окремі результати доповідалися на міжнародних конференціях: • 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics (29 August – 2 September 2011, Kharkov); • 4th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications (3–6 July 2012, Lviv); • Bogolyubov Conference «Problems of Theoretical Physics» (24–26 May 2016, Kyiv); • 30th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics (3–8 September 2017, Kraków, Poland).

Публікації. Представлені у дисертації матеріали опубліковано у 10 роботах. Серед них 5 статей в реферованих журналах [1–5] та 5 тез конференцій [6–10].

Структура та об'єм роботи. Дисертація складається із анотації, вступу, чотирьох розділів основної частини з 29 рисунками, висновків, переліку посилань зі 128 найменувань та трьох додатків. Повний об'єм дисертації становить 154 сторінки, перелік посилань займає 14 сторінок.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У *вступі* обґрунтована актуальність теми дослідження, сформульовані мета та задачі, показана наукова та практична цінність отриманих результатів.

У *першому розділі* основну увагу приділено вивченню особливостей структури сліду (збурення густини), який виникає за розсіяння потоку газу на окремій домішці та при наявності короткосяжного відштовхування між частинками газу. З цією метою використовується модель класичного Ленгмюрового ґраткового газу.

Кінетика ґраткового газу визначається випадковими стрибками частинок на сусідні вільні вузли прямокутної ґратки. Зміна заселеності i -го вузла частинками сорту α за час Δt , $\tau_0 \ll \Delta t \ll \tau_l$ (τ_0 — тривалість стрибка на сусідній вузол, τ_l — час життя частинки на вузлі), описується стандартним рівнянням неперервності:

$$n_i^\alpha(t + \Delta t) - n_i^\alpha(t) = \sum_j (J_{ji}^\alpha - J_{ij}^\alpha) + \delta J_i^\alpha. \quad (1)$$

Тут $n_i^\alpha = 0, 1$ — локальні числа заповнення i -го вузла частинками сорту α , $J_{ij}^\alpha = v_{ij}^\alpha n_i^\alpha (1 - \sum_\beta n_j^\beta) \Delta t$ — середня кількість стрибків частинок α з i -го на сусідній j -й вузол за час Δt , $\beta(\alpha) = 1, 2$ — сорт частинок, а $v_{ij}^\alpha = v^\alpha$ є середньою частотою цих стрибків. Доданок $\delta J_i^\alpha = \sum_j (\delta J_{ji}^\alpha - \delta J_{ij}^\alpha)$ є ланжевенівським джерелом, що визначається флуктуаціями δJ_{ji}^α кількості стрибків між вузлами j та i за час Δt . Ці флуктуації зумовлені швидкими, порівняно з часами Δt , процесами, якими для простоти було знехтувано. Якщо частота стрибків частинок одного сорту (n^1) мала, $v_{ij}^1 \rightarrow 0$, то відповідну компоненту газу (далі, $n^1 \equiv u$) можна вважати статичною, а її розподіл буде задавати неоднорідності середовища (домішки, включення) для мобільних частинок іншої компоненти (далі, $n^2 \equiv n$). Для регулярної ґратки за відсутності зовнішніх полів $v_{ji} = v = const$. Вважаючи механізм стрибків активаційним, а зовнішнє поле \mathbf{G} — малим, частоту стрибків можна представити у вигляді $v_{ji} \approx v[1 + (\mathbf{G}, \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/(2kT)]$, або $v^\pm \approx v \pm \delta v$, де v^+ позначає частоту стрибків вздовж поля, v^- — проти поля, $\delta v = v\ell|\mathbf{G}|/(2kT)$ (ℓ — стала ґратки) і припускається, що $\ell|\mathbf{G}|/(2kT) < 1$. Для чисельних розрахунків використовується рівняння (1) в наближенні локальної рівноваги, тобто рівняння на середні числа заповнення вузлів:

$$\partial_t \langle n_i \rangle = \sum_j (\langle J_{ji} \rangle - \langle J_{ij} \rangle), \quad \langle J_{ji} \rangle = v_{ji} \langle n_j \rangle (1 - \langle n_j \rangle - u_i), \quad (2)$$

де $\langle n_i \rangle = \langle n(\mathbf{r}_i) \rangle \in [0, 1]$ описує середні числа заповнення на вузлах i , а $n_0 \equiv n(|\mathbf{r}| \rightarrow \infty)$ — рівноважна концентрація газу. Для аналітичних розрахунків використовується довгохвильове наближення (континуальний ліміт), в якому макроскопічна кінетика мобільної компоненти n описується рівнянням:

$$\partial_\tau n = \nabla^2 n - \nabla(u \nabla n - n \nabla u) - (\mathbf{g} \cdot \nabla)[n(1 - u - n)], \quad (3)$$

де $n(\mathbf{r}, \tau)$ та $u(\mathbf{r})$ — середні числа заповнення в точці \mathbf{r} , які можуть набувати значень в інтервалі $[0, 1]$, а $\mathbf{g} = \ell \mathbf{G}/(2kT)$. Тут введені безрозмірні координата $\mathbf{r}/\ell \rightarrow \mathbf{r}$ та час $\tau = vt$. Якщо друга компонента теж мобільна, $u = u(\mathbf{r}, t)$, рівняння на неї має вигляд аналогічний (3). В такому випадку доданок $\nabla(u \nabla n - n \nabla u)$ відповідає за змішування двох компонент газу, тобто за ефекти захоплення (потокком одної компоненти іншої) та від'ємного масоперенесення. Нелінійний дрейфовий доданок $(\mathbf{g} \cdot \nabla)[n(1 - u - n)]$ відповідає за ефект блокади.

Перевагою використання двокомпонентної моделі та її граничного випадку з одною статичною компонентою є також те, що при описі включення/домішки $u(\mathbf{r})$ з різкою межею (та розміру значно більшого сталої ґратки ℓ), рівняння (3) дозволяє адекватно ввести умови зшивки. Двокомпонентна модель також дає змогу ввести середню (ефективну) проникність домішки $u(\mathbf{r}) \in [0,1]$ частинками газу.

Однак, використовувані наближення мають і ряд недоліків, так як вони є досить грубими і не дозволяють врахувати цілий ряд важливих аспектів. Зокрема, нехтуючи флуктуаціями в газі, тобто доданком δJ_i^α в рівнянні (1), ми не враховуємо флуктуаційно індуковані (Casimir-like) сили, які можуть бути суттєвими для ефекту спарювання при малих відстанях між домішками. При використанні наближення локальної рівноваги втрачається інформація про короткосяжні кореляції в газі, такі як «зворотні кореляції», які повинні виникати біля поверхонь включень (тобто поблизу іншої компоненти газу).

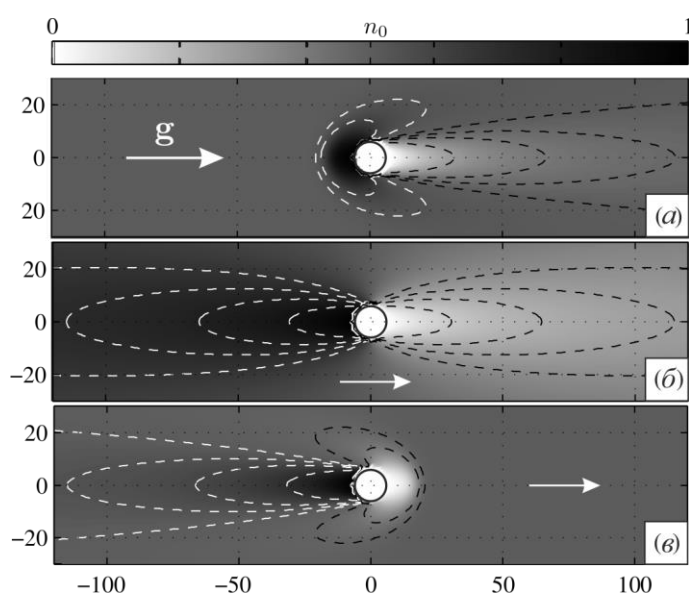


Рис. 1 Стаціонарні розподіли середніх чисел заповнення $\langle n(x_i, y_i) \rangle$ двовимірної ґратки частинками газу, при рівноважній концентрації газу а) $n_0 = 0.2$, б) $n_0 = 0.5$, в) $n_0 = 0.8$. Зовнішнє поле $|\mathbf{g}| = 0.5$ направлено вздовж Ox , непроникне включення радіуса $R = 7\ell$ (ℓ — стала ґратки) розташовано в центрі. Сірий колір тла відповідає рівноважній концентрації газу n_0 . Координати наведені в одиницях ℓ .

На Рис. 1 наведено чисельно отримані стаціонарні розподіли середніх чисел заповнення вузлів для частинок ґраткового газу в зовнішньому полі \mathbf{g} ; поле створює потік, який розсіюється на фіксованому включенні (розмір включення $R \gg \ell$). При малій концентрації газу збурення-слід має типову структуру з протяжним збідненим хвостом позаду включення і компактною щільною областю спереду, що часто спостерігається, наприклад, в колоїдних суспензіях з малою концентрацією броунівських частинок.

У випадку високих концентрацій ($n_0 > 1/2$), профіль набуває нестандартного вигляду зі щільною протяжною областю газу перед включенням та локалізованою областю збіднення позаду нього, Рис. 1в. Така поведінка пов'язана з ефектом блокади частинок ґраткового газу. Умова, що на вузлі може знаходитись лише одна частинка, еквівалентна безмежно сильному відштовхуванню між частинками на одному вузлі. Міжчастинкове відштовхування призводить до режиму блокади, газ стає нестисним перед включенням, що фактично означає зростання ефективного розміру включення. При достатньо високій концентрації газу, частинки не будуть встигати виходити з зони блокади за рахунок латеральної дифузії і, як результат, ефективний

розмір включення зростатиме. Іншими словами, буде зростати щільна область перед включенням. При збільшенні концентрації, зростає роль міжчастинкового відштовхування, що проявляється як ефект блокади, коли перед включенням починає формуватися протяжна щільна компактна область.

Показано, що інверсія сліду впливає з симетрії «вакансія-частинка» властивої рівнянню (3). В розглянутому випадку центральносиметричного включення, збуренню густини газу $\delta n(x, y; n_0)$, що виникає при значенні концентрації n_0 , завжди відповідає інверсний профіль збурення $\delta n(x, y; 1 - n_0)$ при значенні $1 - n_0$:

$$\delta n(x, y; 1 - n_0) = -\delta n(-x, y; n_0).$$

Тут поле \mathbf{g} направлене вздовж вісі OX . В окремому випадку, при $n_0 = 1/2$, профіль збурення густини має симетричний вигляд, як на Рис. 1б.

Далі представлено характерні асимптотики загасання збурення густини на великих відстанях від включення, які вдається отримати аналітично в наближенні лінійного потоку, адаптувавши для даної задачі метод вторинних поверхневих джерел (підхід потенціалу простого шару). З цією метою, розглянуто стаціонарну задачу (3):

$$\nabla \cdot [\varepsilon(\nabla\delta\psi - 2\mathbf{q}\delta\psi - \mathbf{Q})] = 0, \quad (4)$$

де було здійснено перехід до нової функції $\psi(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r})/[1 - u(\mathbf{r})]$, а розв'язок $\psi(\mathbf{r}) \approx \psi_0 + \delta\psi(\mathbf{r})$ представлено як мале відхилення $\delta\psi(\mathbf{r})$ від рівноважного розподілу $\psi_0 = n_0$; $\mathbf{Q} = n_0(1 - n_0)\mathbf{g}$ та $\mathbf{q} = (1/2 - n_0)\mathbf{g}$, $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r}) = [1 - u(\mathbf{r})]^2$. Використовується представлення розв'язку у вигляді потенціалу простого шару

$$\delta n(\mathbf{r}) = \int_S G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mu_j(\mathbf{r}')d\mathbf{r}', \quad (5)$$

де $\mu(\mathbf{r}')$ — це індукована густина на поверхні включення S , інтегральне рівняння для якої в компактному вигляді може бути записане як

$$2\lambda[\nabla_n^+ - 2q_n(\mathbf{r})] \int_S G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mu(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' + (\lambda - 1)\mu(\mathbf{r}) = 2\lambda Q_n(\mathbf{r}), \quad (6)$$

де $\mathbf{r} \in S$, $\lambda = \lambda(\bar{u}) = (1 - \varepsilon)/(1 + \varepsilon)$. Функція Гріна визначається несиметричним анізотропним екранованим кулонівським потенціалом

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^{-q|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|+q\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad \text{або} \quad G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi} e^{\mathbf{g}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} K_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (7)$$

у три- та двовимірному випадках, відповідно. Дане представлення дозволяє правильно описати несиметричну форму збурення (слід), аналітично пояснити інверсію сліду при збільшенні рівноважної концентрації n_0 та послідовно ввести поняття поляризації включення, тобто індукованого «заряду» на його поверхні, сумарна величина якого є відмінною від нуля.

В цих наближеннях профіль перед ($\vartheta = \pi$) і за включенням ($\vartheta = 0$), наприклад, для випадку $n_0 < 1/2$ ($\beta = 1$), можна записати у вигляді

$$n(r, \vartheta = 0) \simeq n_0 - A \left\{ K_1(z)I_2(z)(qr)^{-\frac{1}{2}} + \left[\frac{1}{2z} + \frac{3}{8}K_1(z)I_2(z) \right] (qr)^{-\frac{3}{2}} \right\}, \quad (8a)$$

$$n(r, \vartheta = \pi) \simeq n_0 + Ae^{-2qr} \left\{ \left[\frac{2}{z} + K_1(z)I_2(z) \right] (qr)^{-\frac{1}{2}} + \left[\frac{1}{4z} + \frac{3}{8}K_1(z)I_2(z) \right] (qr)^{-\frac{3}{2}} \right\}, \quad A = \frac{\sqrt{2\pi}n_0(1 - n_0)|\mathbf{g}|R}{zK_1(z)K_2(z)}. \quad (8b)$$

В граничному випадку малого радіусу включення, $z \ll 1$, асимптотика збідненої області позаду нього (сліду) поводить себе як $\sim -\sqrt{\pi}n_0(1 - n_0)||qR^2(2qr)^{-3/2}$ і непо-

гано узгоджується з чисельними результатами для домішки з характерним розміром порядку сталої ґратки ℓ (див. Рис. 2).

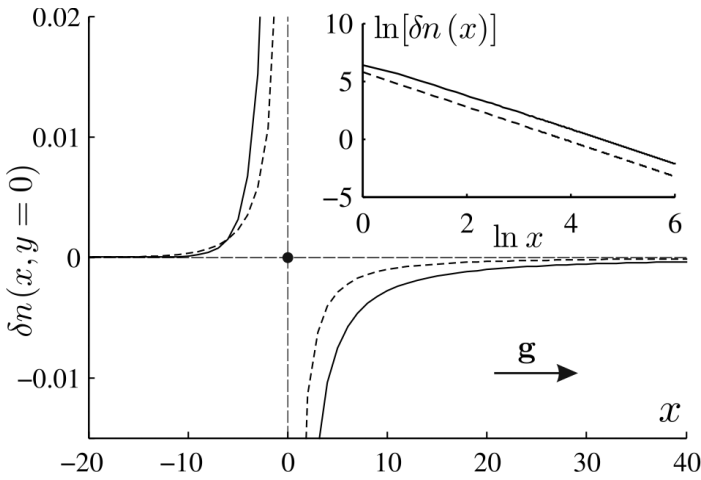


Рис. 2 Поведінка профілю $\delta n(x; y = 0)$. Суцільна лінія відповідає чисельному розв'язку (наближення середнього поля), а штрихова — асимптотичному розв'язку (довгохвильове наближення) при $n_0 = 0.1$, $|\mathbf{g}| = 0.5$ та $R = 0.5$; нахил прямих на внутрішньому графіку відповідає показнику асимптотики $-3/2$ при $x \gg 1$.

Ці асимптотики мають сенс лише на великих відстанях від домішки. Близько до поверхні включень великого розміру, домінують нелінійні ефекти. Це проявляється у формуванні щільної компактної області з характерним різким градієнтом концентрації у вигляді сходинок, який нагадує доменну стінку, або фронт ударної хвилі. Аналогічні компактні структури виникають в запорошеній плазмі. Вони формуються потоком менших порошинок перед войдом, сформованим великими порошинами.

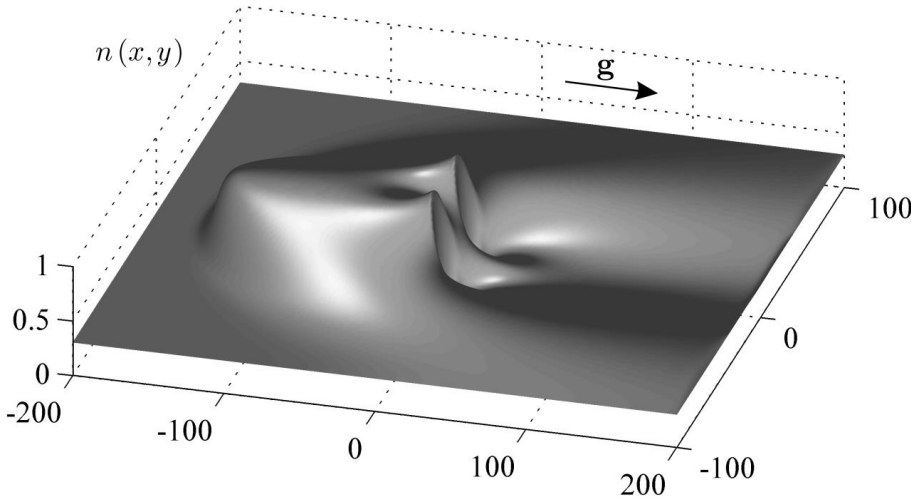


Рис. 3 Концентраційний розподіл $n(x_i, y_i)$ з профілем у вигляді кінка, що сформувався перед двома близько розташованими включеннями при $n_0 = 0.3$. Відстань між центрами включень становить 4ℓ .

Для близько розташованих включень екранування потоку ще більше посилюється, Рис. 3, що призводить до формування спільної, колективної і нелінійної шуби збурення, що може призводити до різкого підсилення дисипативної взаємодії.

У **другому розділі** проаналізовано поведінку дисипативних сил, що діють між включеннями в залежності від відстані між ними, їх взаємної просторової орієнтації, величини зовнішнього поля, яке індукує потік, та від рівноважної концентрації газу. Розділ починається обговоренням проблеми введення сили в рамках використовуваної моделі. Далі, в **підрозділі 2.3** показано, що перемикання знаку дисипативної взаємодії між включеннями при зростанні концентрації газу n_0 є прямим наслідком симетрії «вакансія-частинка» властивої рівнянню (3). В **підрозділі 2.4**, на основі числових розрахунків для рівняння (2), яке враховує нелінійний ефект блокади для час-

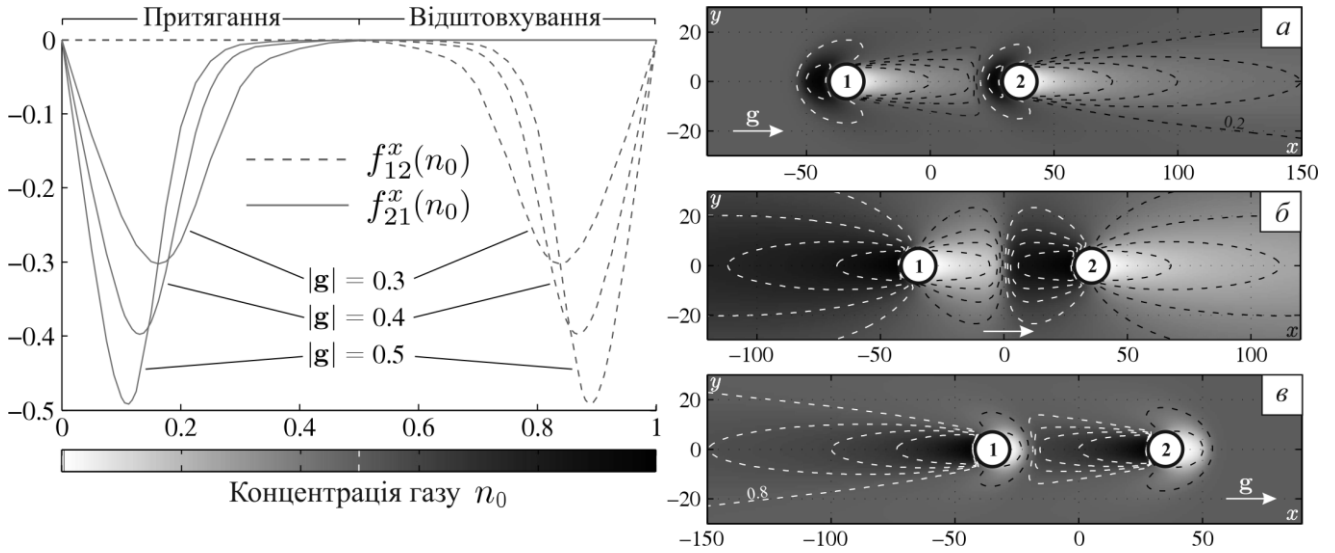


Рис. 4 *Ліва панель:* Концентраційна залежність дисипативних сил f_{12}^x та f_{21}^x (в одиницях kT/ℓ) між поздовжньо розташованими включеннями при різних значеннях зовнішнього рушійного поля $|g|$. *Права панель:* відповідні двовимірні розподіли концентрації газу поблизу включень при а) $n_0 = 0.2$, б) $n_0 = 0.5$, в) $n_0 = 0.8$

тинок газу, розглядаються індуковані дисипативні сили між двома включеннями для двох випадків їх взаємного розташування (вздовж потоку газу, Рис. 4, і перпендикулярно до нього). Повна сила, що діє на задане включення, складається з частини, яка пов'язана з «індивідуальною» силою тертя на одиноке включення, і частини, пов'язаної з впливом іншого включення. Щоб виділити вклад взаємного впливу включень з повної дисипативної сили, розглядалася величина $f_{ij} = f_i - f_i^0 = \int [\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) - \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i)] \nabla u_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$. На основі залежностей дисипативних сил від рівноважної концентрації n_0 , Рис. 4, показано ефект перемикавання (зміни знаку) ефективної взаємодії, зумовлений інверсією сліду, розглянутою в попередньому розділі.

Залежність величини дисипативної взаємодії між включеннями від величини зовнішнього рушійного поля виявляється не монотонною, Рис. 5. Характерний пік взаємодії відповідає тим значенням величини зовнішнього поля при яких найбільш виражене формування спільного збурення навколо пари включень. Подано якісне пояснення такої поведінки змінами форми збурень густини.

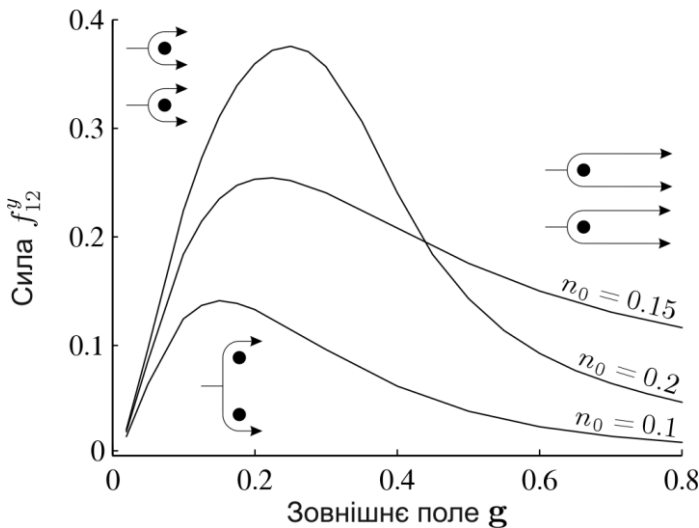


Рис. 5 Дисипативна сила f_{12}^y (для поперечної конфігурації) як функції величини зовнішнього поля g для кількох значень концентрації газу n_0 . Радіуси включень $a = 7\ell$, відстань між їх центрами $r_{12} = 4a$, значення сил приведені в одиницях kT/ℓ . Наведено схематичні ілюстрації того як трансформується спільне збурення густини навколо пари включень.

Також показано, що формування спільного чи колективного сліду від включень підсилює ефективну дисипативну взаємодію між ними і суттєво залежить від величини зовнішнього поля, концентрації газу та взаємного розташування включень.

В підрозділі 2.5 аналітично розглядається випадок далеко рознесених малих домішок, коли нелінійні ефекти менш суттєві. В рамках підходу потенціалу простого шару вираз для сили на k -те включення має вигляд

$$\mathbf{f}_k = - \sum_j \int_{S_k} \int_{S_j} \mathbf{n}(\mathbf{r}_k) G(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j) \mu_j(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_k d\mathbf{r}_j. \quad (9)$$

Загальний вигляд дисипативної сили на k -те включення з боку i -го у двовимірному випадку:

$$\mathbf{f}_{ki} \sim - \frac{e^{-q|\mathbf{r}_{ki}|+q\mathbf{r}_{ki}}}{|\mathbf{r}_{ki}|^{1/2}} \int_{S_k} \mathbf{n}(\mathbf{x}_k) I(\mathbf{r}_{ki}, \mathbf{q}, \mathbf{x}_k) d\mathbf{x}_k, \quad (10)$$

де $I(\mathbf{r}_{ki}, \mathbf{q}, \mathbf{x}_k)$ містить степеневу залежність від \mathbf{r}_{ki} завдяки мультипольному розкладу і у випадку $a_i \ll r_{ik}$ залежить лише від взаємної орієнтації включень по відношенню до зовнішнього поля \mathbf{g} , тобто від θ_{ki} — кута між \mathbf{r}_{ki} і \mathbf{g} . Таким чином, для поздовжнього розташування включень головна асимптотика поводить себе як $f_{12}^x \approx A|\mathbf{r}_{12}|^{-3/2}$, що узгоджується з чисельно розрахованим на основі рівнянь (2) результатом для нелінійної задачі, див. Рис. 5а, коли відстань між включеннями $|\mathbf{r}_{12}|$ набагато більша ніж їх радіуси a_i . Формфактор A залежить лише від зовнішнього поля \mathbf{g} і радіуса включення a_i . Для поперечного розташування, головна асимптотика сили поводить себе експоненційно, $\ln f_{12}^y \propto -q|\mathbf{r}_{12}| + \dots$, що також знаходиться в якісному узгодженні з чисельними результатами, див. Рис. 6б.

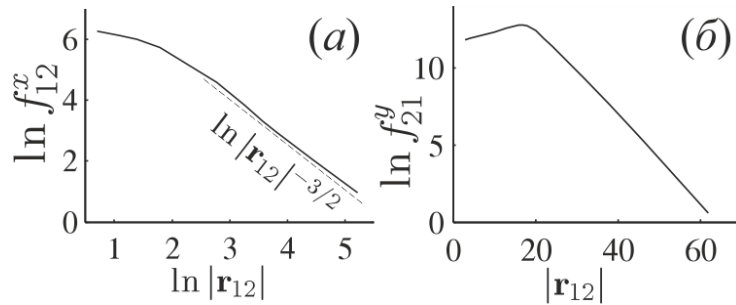


Рис. 6 Асимптотична поведінка дисипативних сил (а) f_{12}^x (поздовжнє розташування) та (б) f_{12}^y (поперечне розташування) у випадку, коли включення рознесені на велику відстань r_{12} . Штрихова лінія відповідає асимптотиці $f_{12}^x \sim r_{12}^{-3/2}$. Концентрація газу $n_0 = 0.8$, зовнішнє поле \mathbf{g} ($|\mathbf{g}| = 0.5$) направлене вздовж OX , два непроникні круглі включення мають радіус $a = 7$ (в одиницях ℓ), сили приведені в одиницях kT/ℓ .

Основним результатом цього підрозділу є те, що індукована дисипативна взаємодія, як вдається показати для ансамблю малих віддалених домішок, належить до взаємодії типу індукованої диполь-дипольної (взагалі, мультипольної). На відміну від звичайної електростатичної взаємодії між поляризованими частинками в електричному полі, отримані вирази описують взаємодію між індукованими «асиметричними» диполями (з ненульовим повним індукованим «зарядом»), яка асоційована з несиметричним анізотропним екранованим кулонівським «потенціалом» з виділеним напрямком анізотропії \mathbf{q} . Розвинений підхід дозволяє описати як неньютонівський характер дисипативної взаємодії, $\mathbf{f}_{ki} \neq -\mathbf{f}_{ik}$, так і ефект її концентраційного перемикавання (зміни знаку). Водночас, наближення лінійного потоку придатне для малих і

далеко рознесених включень та не дозволяє описати нелінійні ефекти, які є суттєвими для близько розташованих включень або поблизу поверхні включень великих розмірів.

Слід зауважити, що для достатньо близько розташованих включень нелінійне притягання між ними може бути визначальним фактором дисипативного спарювання, коли навколо пари включень формується спільне збурення. При великій концентрації газу ($n_0 > 1/2$), збіднені на частинки каверни, які формуються навколо кожного включення (див. Рис. 4в), можуть обумовлювати специфічну поведінку дисипативних сил в залежності від відстані між включеннями. Зокрема, асимптотична поведінка ефективної взаємодії між двома включеннями в безпосередній близькості зазнає різкої зміни, як це показано на Рис. 6, що може бути ознакою ефекту дисипативного спарювання.

У *третьому розділі* розглядається колективне розсіяння потоку частинок на кластерах домішок, Рис. 7, в умовах нелінійного ефекту блокади в газі.

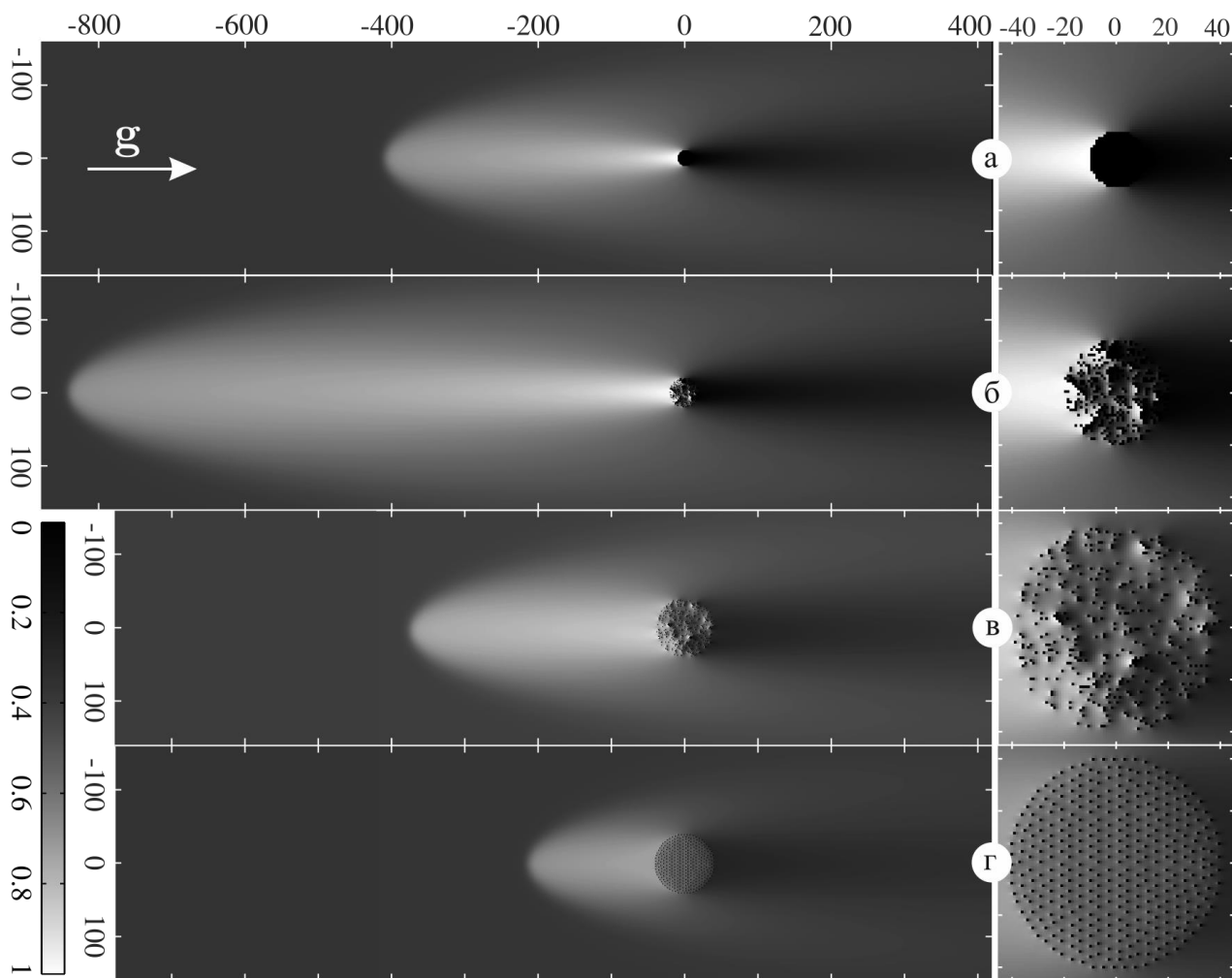


Рис. 7 Стационарні розподіли середніх чисел заповнення $\langle n(x_i, y_i) \rangle$. Справа приведено збільшені зображення внутрішньої структури для кожного кластера: (а) суцільний (непроникний) кластер, (б) та (в) неупорядковані кластери, (з) регулярний (впорядкований) кластер. $R = 10.8\ell$ для (а), $R = 20\ell$ для (б), $R = 40\ell$ для (в)–(з). Для всіх приведених розподілів: кількість домішок N , що формують кластери, однакова ($N = 362$), $n_0 = 0.37$, $|\mathbf{g}| = 0.5$, координати наведено в одиницях ℓ .

Як видно з порівняння Рис. 7а–е, гетерогенна фрагментація суцільного включення на сукупність окремих домішок (кластер) може значно підсилювати розсіяння потоку газу. Нерегулярно впорядкований кластер, Рис. 7д, породжує значно сильніше розсіяння порівняно з регулярно впорядкованим, Рис. 7г. Повна сила, що діє на кластер домішок суттєво залежить як від його щільності ϕ , так і від внутрішньої структури (впорядкування). Як видно з Рис. 8, поведінка залежності $f(\phi)$ для регулярно і нерегулярно впорядкованих кластерів принципово відрізняється: для останнього має місце характерний пік підсилення.

Показано, що всередині випадково неоднорідного кластера, Рис. 9 виникають сильні локальні флуктуації розсіяного поля δn , які суттєво більші за «середнє» поле n_0 (рівноважна концентрація газу). Аналогічний ефект сильних локальних флуктуацій розсіяного поля виникає, наприклад, при розсіянні електромагнітного поля на фрактальних кластерах наночастинок. Наявність таких флуктуацій означає, що розсіяння потоку газу на такого типу структурах неможливо адекватно описати шляхом введення ефективного коефіцієнта дифузії для кластера чи коефіцієнта глибини проникнення, а з іншого боку, наявність сильних градієнтів густини (флуктуацій) може зумовити також значні локальні флуктуації сил, як на окремі домішки так і сил дисипативної взаємодії між домішками.

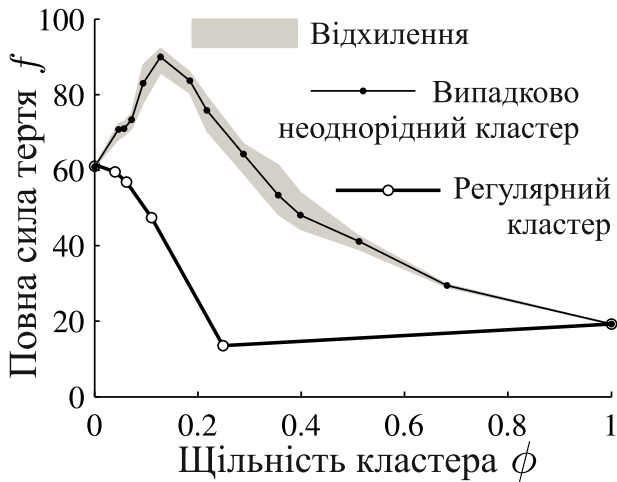


Рис. 8 Залежність повної сили тертя $f \equiv |f|$ (в одиницях kT/ℓ) від щільності кластера ϕ . (б) Залежність кореня дисперсії збурення $\sqrt{\varepsilon}$ від щільності кластера ϕ ; $R \in (\infty, 10.8\ell]$, $N = 362$, $|\mathbf{g}| = 0.5$, $n_0 = 0.2$.

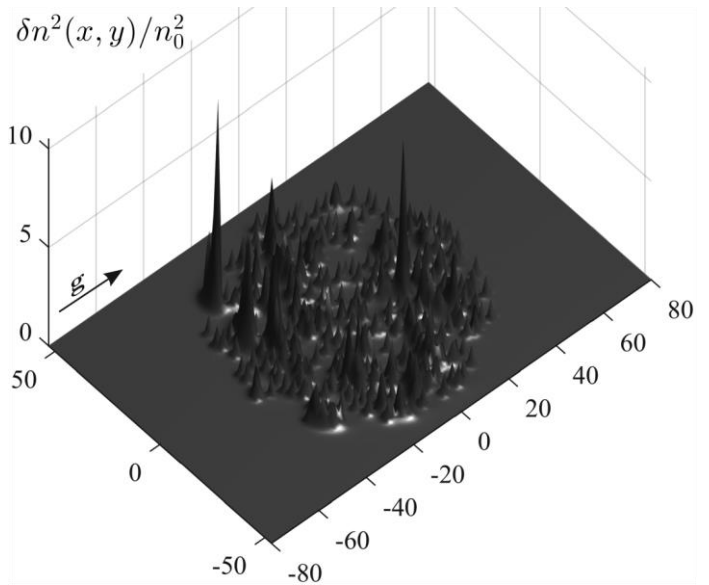


Рис. 9: Сильні локальні флуктуації розсіяного поля $\delta n(\mathbf{r})$ всередині випадково неоднорідного кластера домішок. Кластер складають $N = 362$ домішок, випадково розподілених в межах круга з радіусом $R = 45\ell$ ($\phi = 0.0569$); $|\mathbf{g}| = 0.5$, $n_0 = 0.2$.

У **підрозділі 3.3** розглядається динаміка формування профілю збурення в часі в неадиабатному режимі, коли зовнішнє поле, яке тягне частинки газу і створює потік, вмикається раптово. При цьому, генеруються відразу дві ударні хвилі, як показано на Рис. 10 для компактного включення: одна рухається за потоком (ударна хвиля розріджування) і формує стаціонарний розподіл збідненого хвоста, а інша (ударна хвиля стиснення) — назустріч потоку.

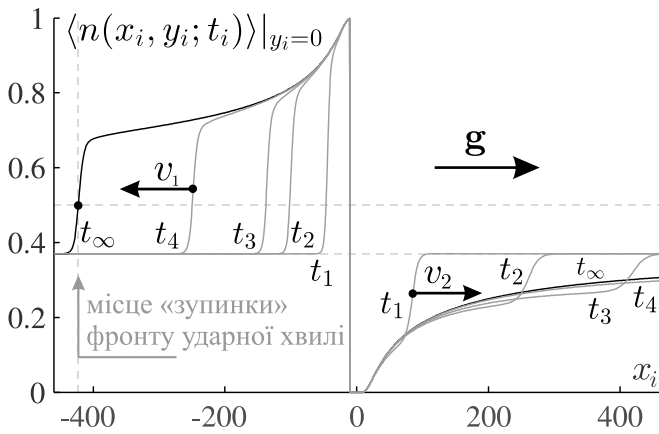


Рис. 10 Зупинка ударної хвилі. Профілі збурення $n(x_i, y_i)|_{y_i=0}$ навколо суцільного непроникного круглого включення радіусу $R = 10.8\ell$ в послідовні моменти часу $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$ при концентрації газу $n_0 = 0.37$ та $|g| = 0.5$. Профіль при $vt_\infty = 5 \times 10^4$ відповідає стаціонарному розподілу на великих часах (відповідний двовимірний розподіл густини приведено на Рис. 7a).

Такий механізм формування сліду як залишкового збурення після проходження ударної хвилі є спільним також і для всіх типів кластерів представлених на Рис. 6. В тому числі, для всіх них є спільною і ще одна властивість — це ефект зупинки ударної хвилі. При концентрації газу менше $n_0 < 0.5$, Рис. 6, фронтальна ударна хвиля, яка описує ріст області блокади, завжди зупиняється на певній відстані від включення. Кількісний критерій зупинки, коли швидкість фронту v_1 зануляється, отримано на основі квазіодновимірного рівняння Бюргерса, яке допускає розв'язки типу доменної стінки або ударної хвилі, і має вигляд: $v = 2g(1/2 - n_f)$, де $n_f \equiv n(x_f)$ — це значення концентрації в точці положення фронту ударної хвилі x_f . Отриманий критерій дійсно підтверджується чисельними розрахунками.

В цьому ж підрозділі показано один з можливих нестационарних механізмів релаксації початкового збурення. Він характерний для достатньо щільних кластерів, коли перед ними формується колективна область блокади. При раптовій активації потоку, кластер генерує на початкових часах надлишкове збурення, яке релаксує через тимчасове прискорення ударної хвилі на малих часах, як це показує поведінка швидкості фронту на Рис. 11. Така поведінка найбільш виражена для випадково неоднорідного кластера, що корелює з результатами відомим явищем при взаємодії повітряної ударної хвилі з пористим екраном, де спостерігався ефект Гельфанда тимчасового підсилення відбитої ударної хвилі.

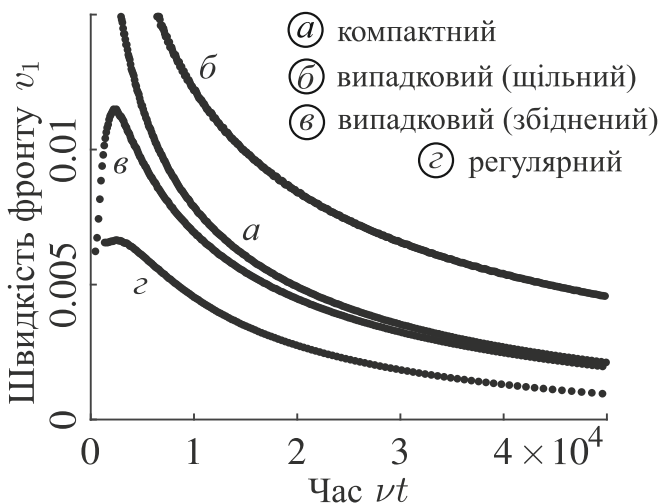


Рис. 11 Часова залежність швидкості v_1 [в одиницях $\ell/(vt)$] руху фронтальної ударної хвилі для кластерів з Рис. 7a–г; відповідні криві позначено a–г, так само як на Рис. 7.

Другий механізм релаксації початкового збурення подано в **підрозділі 3.3.1**. Він характерний для кластерів малої щільності, коли спільна область блокади перед клас-

тером не формується. В цьому випадку надлишкове збурення «відривається» від кластера у вигляді згустка частинок, що у профілі має вигляд горба (при $n_0 > 0.5$) який рухається назустріч потоку, Рис. 12б–в і нагадує поведінку солітонів-передвісників у нерівноважній запорошеній плазмі. При $n_0 < 0.5$ аналогічна солітоноподібна структура має вигляд згустка вакансій (область збідненого газу), який рухається за потоком, Рис. 12а і нагадує сходження лавини.

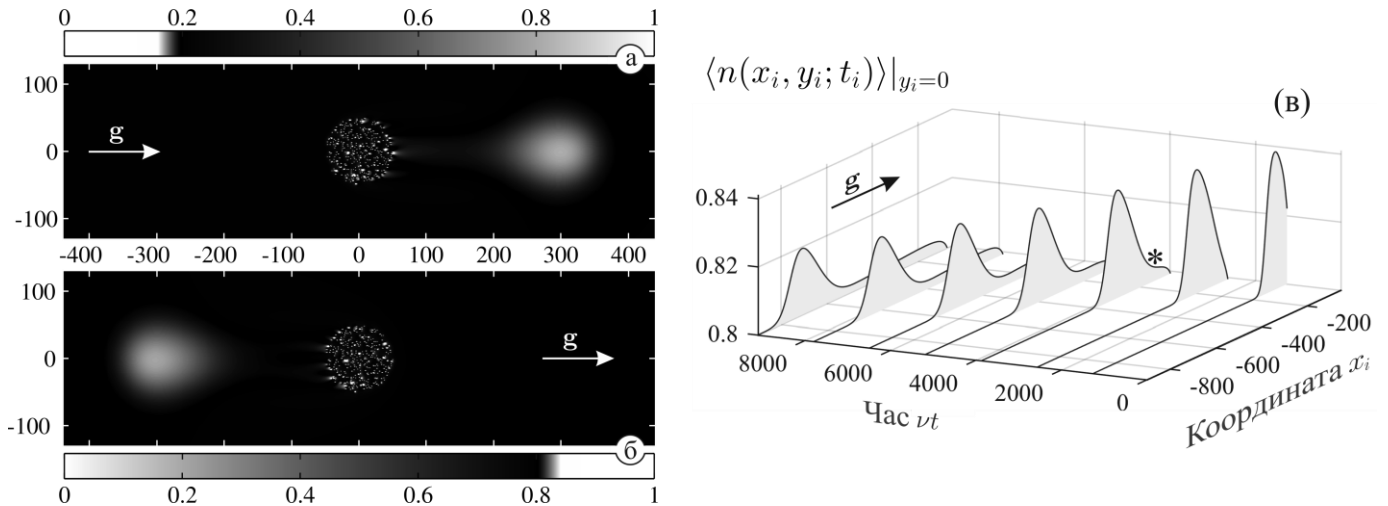


Рис. 12 Миттєві розподіли концентрації газу $|\delta n(x_i, y_i)|$ в момент часу $vt = 3.9 \times 10^3$ ілюструють рух солітоноподібних структур: згусток частинок газу (б) або вакансій (а), що відділяється від кластера. На панелі (в) показано еволюцію в часі профілю густини $\delta n(x, t; y = 0)$, що відповідає «солітону-передвіснику» у вигляді горба, який рухається на зустріч потоку частинок газу. Профіль позначений зірочкою відповідає розподілу, приведенному на панелі (б). Щільність випадкового кластера $\phi = 0.0461$, концентрація газу $n_0 = 0.2$ для (а), $n_0 = 0.8$ для (б) та (в), $|\mathbf{g}| = 0.5$.

Слід зазначити, що поведінка системи також є чутливою до змінних потоку газу: концентрації n_0 та величини зовнішньої рушійної сили \mathbf{G} . Зокрема, властивість зупинки ударної хвилі узгоджується з ефектом концентраційної інверсії сліду. В інтервалі $n_0 < 0.5$, збільшення n_0 та/чи \mathbf{G} призводить до підсилення розсіяння та ударної хвилі, однак якісна картина розсіяння суттєво не змінюється; детальний характер цих параметричних залежностей подано в *Додатку Б*.

У *четвертому розділі* розглядаються два граничних випадки двокомпонентного ґраткового газу, які відповідають адіабатному наближенню. Спрямовуючи рухливість однієї з двох компонент системи (наприклад, u і n) до нуля, $0 \leftarrow v_u \ll v_n$, отримаємо модель масоперенесення в неоднорідному середовищі, що було розглянуто в *підрозділі 4.2*. Інший граничний випадок відповідає умові, коли рухливість одної з компонент спрямована до нескінченності, $v_u \ll v_n \rightarrow \infty$, тобто компонента u набагато «швидша» і може виступати в ролі «носія взаємодії» для повільної підсистеми n , як наслідок, може призводити до появи додаткових кореляцій, індукованих швидкою підсистемою у повільній підсистемі. Цей випадок розглянуто у *підрозділі 4.1*.

У *підрозділі 4.1* отримано парну кореляційну функцію флуктуацій швидкості $C_{12}(\tau) = \langle \delta v_1(\tau) \delta v_2(0) \rangle$, яка описує відгук одного кластера частинок «повільної» компоненти на збурення швидкості, в початковий момент часу, іншого кластера:

$$C_{12}(\tau) \approx v_n^{-2} j^3 \frac{24\Gamma Q}{D_0} \left(\frac{R(\tau)}{[R(\tau) - Q]^4} + \frac{2QR(\tau)}{[R(\tau) - Q]^5} - \frac{C_0 R(\tau)}{[R(\tau) - Q]^3} \right), \quad (11)$$

де $R(\tau) = [24D\tau + R^2(0)]^{1/2}$, $D_0 = 1 - (u_1 + u_2)/2$, $C_0 = [R(0) + Q]/[R(0) - Q]^2$, має довгочасовий від'ємний хвіст з характерною асимптотикою $C_{12}(\tau \rightarrow \infty) \simeq -\tau^{-1}$. Таким чином, вдалося показати, що досліджувані індуковані кореляції мають такий же характер, як і гідродинамічні кореляції, що виникають між колоїдними частинками в одновимірному каналі, заповненому рідиною.

Щоб проілюструвати особливості транспорту в неоднорідному середовищі, у **підрозділі 4.2** розглянуто процес релаксації в квазіодновимірному випадку (поперечний розмір L_\perp системи менший ніж або того ж порядку, що й характерний розмір неоднорідності для m та n , $L_\perp \leq l_m \sim l_n$), який описується рівнянням

$$\dot{m} = (1 - n)\partial_x^2 m + m\partial_x^2 n. \quad (12)$$

Розпливання початкового гаусового розподілу $m(x, 0) = M \exp(-x^2/4l^2)$ в періодичному потенціалі компоненти $n(x) = (N/2)(1 - \cos k_0 x)$ показано на Рис. 13.

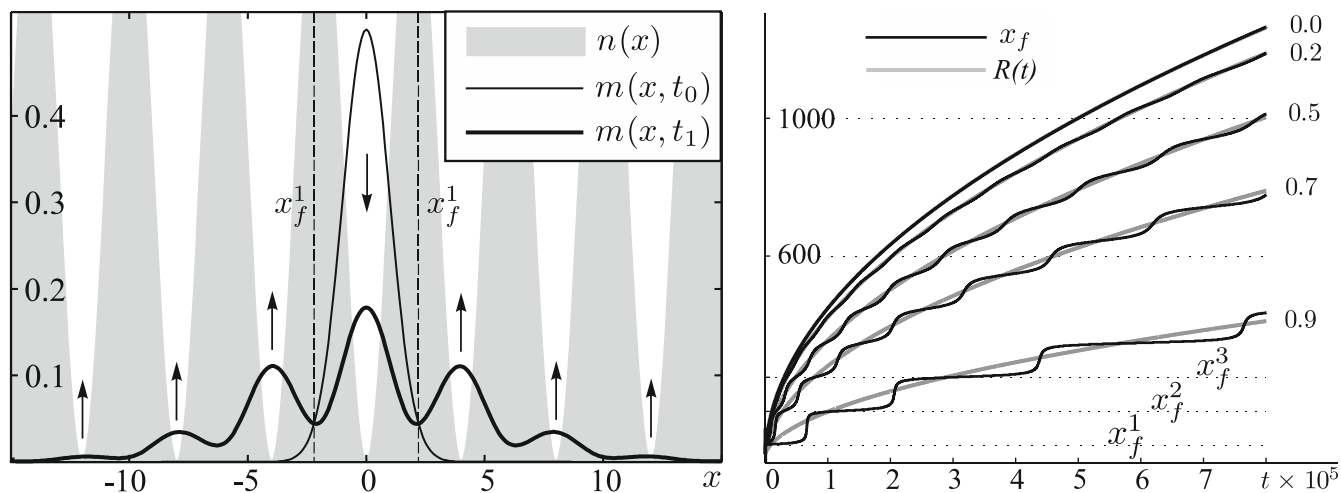


Рис. 13 *Ліва панель:* Релаксація розподілу $m(x, t_0)$ в часі, його фрагментація. Стрілки вказують чи даний суб-пакет стискається (\uparrow) чи розпливається (\downarrow) протягом конкретного інтервалу часу. *Права панель:* Часова залежність фронту пакета $x_f(t)$, означеного як точка де $\dot{m} = 0$, та корінь середньоквадратичного відхилення $R(t) = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = [(\int x^2 m(x, t) dx) / (\int m(x, t) dx)]^{1/2}$, при різних значеннях N . Числа біля кривих вказують відповідні значення N .

Як відомо, адвекція-дифузія може супроводжуватися не стандартною залежністю кореня середньоквадратичного відхилення від часу, $R = \langle r^2 \rangle^{1/2} \sim t^\zeta$, де $\zeta \neq \frac{1}{2}$ — показник аномальної дифузії. **В пункті 4.2** продемонстровано, що дифузійне масо-перенесення від області з меншою густиною до області з більшою густиною в неоднорідному середовищі може локально супроводжувати субдифузійний процес ($\zeta < 1/2$). При цьому така інтегральна характеристика, як корінь середньоквадратичного відхилення R не описує коректно релаксаційний процес. На відміну від випадку звичайної дифузії, рух фронту пакета $x_f(t)$ не співпадає з часовою залежністю кореня середньоквадратичного відхилення.

В пункті 4.2.2 показано можливість стискання початкового профілю густини мобільної компоненти на малих часах. **В пункті 4.2.3** на прикладі квазіодновимірної

граничної задачі продемонстровано, що масоперенесення від області з меншою до області з більшою густиною може мати не лише локальний характер, а бути реалізоване також і на великих масштабах: від границі з меншою густиною до границі з більшою при довільному розподілі $n(x)$ у стаціонарному випадку.

У **висновках** коротко підсумовуються основні результати роботи.

ВИСНОВКИ

1. Продемонстровано можливість концентраційного перемикання направленості профілю сліду при обтіканні фіксованого включення в потоці частинок броунівського газу за наявності короткосяжних міжчастинкових кореляцій.
2. Показано безпосередній вплив блокади частинок газу на зміну знаку ефективної взаємодії між домішками, яка індукована розсіянням потоку газу, в залежності від його концентрації.
3. Показано, що у випадку ансамблю далеко рознесених включень, асимптотика дисипативної взаємодії має форму індукованої диполь-дипольної взаємодії, що асоційована з анізотропним екранованим кулонівським потенціалом. Отримано аналітичні вирази, які описують ефект перемикання ефективної взаємодії, зумовлений інверсією сліду, а також пояснюють неньютонів характер такої взаємодії.
4. Показано, що нелінійний ефект блокади суттєвий для близько розташованих включень, і призводить до формування колективної нелінійної «шуби» збурення з профілем типу доменної стінки. Цьому відповідає максимум величини ефективної дисипативної взаємодії між домішками, що характеризує ефект дисипативного спарювання.
5. Показано, що при наявності нелінійних колективних ефектів, зокрема, ефекту блокади:
 - 5.1. розсіяння потоку газу суттєво підсилюється при гетерогенній фрагментації суцільного включення на кластер домішок;
 - 5.2. амплітуда розсіяння (а також підсилення і прискорення ударної хвилі) на кластері з випадково неоднорідним розподілом домішок є значно більшою, порівняно з впорядкованим розподілом домішок;
 - 5.3. в неадіабатному режимі, показано, що формування збурення газу з профілем типу доменної стінки зумовлено ефектом зупинки ударної хвилі. Встановлено кількісний критерій зупинки для швидкості ударної хвилі;
 - 5.4. показано наявність генерації кластером солітоноподібних структур типу лавин або передвісника;
 - 5.5. показано присутність сильних локальних флуктуацій розсіяного поля всередині кластера.
6. Продемонстровано наявність від'ємних довгочасових кореляцій між частинками повільної підсистеми двокомпонентного ґраткового Ленгмюрового газу, індукованих швидкою підсистемою.
7. Показано, що релаксація густини в сильнеоднорідному середовищі може супроводжуватись від'ємним масоперенесенням. Показано стрибкоподібний рух положення фронту пакета з проходженням через області присутності іншої компоненти, що призводить до фрагментації пакета і сповільнення його розпливання.

Показано, що поведінка середньоквадратичного відхилення, на відміну від руху фронту, відображає лише усереднену динаміку і задовольняє режиму субдифузії.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Lukyanets S. P. Drift effect and «negative» mass transport in an inhomogeneous medium: Limiting case of a two-component lattice gas / S. P. Lukyanets, O. V. Kliushnychenko // *Phys. Rev. E.* — 2010. — Vol. 82. — P. 051111.
2. Kliushnychenko O. V. Induced long-time correlations in a two-component lattice gas / O. V. Kliushnychenko, S. P. Lukyanets // *Eur. Phys. J. Special Topics.* — 2013. — Vol. 216. — P. 127.
3. Ключниченко А. В. Эффект блокады и концентрационное переключение «направления» следа включения в решеточном газе / А. В. Ключниченко, С. П. Лукьянец // *ЖЭТФ.* — 2014. — Т. 145, № 6. — С. 1106–1115.
4. Kliushnychenko O. V. Effects of gas interparticle interaction on dissipative wake-mediated forces / O. V. Kliushnychenko, S. P. Lukyanets // *Phys. Rev. E.* — 2017. — Vol. 95. — P. 012150.
5. Kliushnychenko O. V. Effects of collectively induced scattering of gas stream by impurity ensembles: Shock-wave enhancement and disorder-stimulated nonlinear screening / O. V. Kliushnychenko, S. P. Lukyanets // *Phys. Rev. E.* — 2018. — Vol. 98. — P. 020101(R).
6. Lukyanets S. P. Effects of Anomalous Diffusive Transport Caused by Particle Distinguishability / S. P. Lukyanets, O. V. Kliushnychenko // *Book of Abstracts: 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics (August 29 – September 2, 2011, Kharkov, Ukraine).* — Kharkov: NSC KIPT, 2011. — P. 184.
7. Kliushnychenko O. V. Induced Correlations in Multicomponent Systems / O. V. Kliushnychenko, S. P. Lukyanets // *Book of Abstracts: 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics (August 29 – September 2, 2011, Kharkov, Ukraine).* — Kharkov: NSC KIPT, 2011. — P. 183.
8. Kliushnychenko O. V. Induced long-time correlations in a two-component lattice gas / O. V. Kliushnychenko, S. P. Lukyanets // *Book of abstracts: 4th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications (3–6 July 2012, Lviv, Ukraine).* — Lviv: 2012. — P. 139.
9. Lukyanets S. P. Blockade effect and switching of non-equilibrium depletion forces in gas of interacting Brownian particles / S. P. Lukyanets, O. V. Kliushnychenko // *Program & Abstracts: Bogolyubov Conference «Problems of Theoretical Physics» (24–26 May 2016, Kyiv, Ukraine).* — P. 51.
10. Kliushnychenko O. V. Switching of wake-mediated interaction caused by blockade effect and collective wake formation / O. V. Kliushnychenko, S. P. Lukyanets // *30th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics (3–8 September 2017, Kraków, Poland).* — P. 33.

АНОТАЦІЯ

Клюшніченко О. В. Індукована дисипативна взаємодія та колективне розсіяння в Ленгмюровому гратковому газі. — Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. — Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ, 2019.

Дисертаційна робота присвячена теоретичному вивченню нерівноважних явищ в полікомпонентних дисипативних системах з короткосяжною міжчастинковою взаємодією. На основі моделі Ленгмюрового граткового газу показано ряд особливостей, пов'язаних з формуванням нерівноважних структур типу страт, збурень-слідів, ударних хвиль та пост-солітонних структур, а також ряд ефектів, що виникають при розсіянні потоку газу на ансамблі домішок та обумовлені ефектом блокади. Показано ефекти інверсії сліду, перемикання знаку дисипативної взаємодії між домішками, ефекти підсилення та зупинки ударної хвилі, підсилення колективного розсіяння випадково неоднорідними структурами. Описано властивості неньютонівської індукованої дисипативної взаємодії та її асимптотична поведінка при колективному розсіянні потоку взаємодіючих частинок на домішках в режимі нелінійного ефекту блокади в газі. Показано можливість локального від'ємного масоперенесення в неоднорідному середовищі та наявність індукованих довгочасних від'ємних кореляцій в двокомпонентному гратковому газі.

Ключові слова: модель граткового газу, ефект блокади, індукована дисипативна взаємодія, ударна хвиля, колективне розсіяння, індуковані довгочасові від'ємні кореляції, субдифузія.

АННОТАЦИЯ

Клюшниченко А. В. Индуцированное диссипативное взаимодействие и коллективное рассеяние в ленгмюровском решеточном газе. — Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. — Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Киев, 2019.

Диссертационная работа посвящена теоретическому изучению неравновесных явлений в поликомпонентных диссипативных системах с короткодействующим межчастичным взаимодействием. На основе модели ленгмюровского решеточного газа показано ряд особенностей, связанных с формированием неравновесных структур типа страт, возмущений-следов, ударных волн и пост-солитонных структур, а также ряд эффектов, которые возникают при рассеянии потока газа на ансамбле примесей и обусловлены эффектом блокады. Показано эффекты инверсии следа, переключения знака диссипативного взаимодействия между примесями, эффекты усиления и остановки ударной волны, усиления коллективного рассеяния случайно неоднородными структурами. Описано свойства неньютоновского индуцированного диссипативного взаимодействия и его асимптотическое поведение при коллективном рассеянии потока взаимодействующих частиц на примесях в режиме нелинейного эффекта блокады в газе. Показана возможность локального отрицательного массопереноса в неоднородной среде и наличие индуцированных долговременных отрицательных корреляций в двухкомпонентном решеточном газе.

Ключевые слова: модель решеточного газа, эффект блокады, индуцированное диссипативное взаимодействие, ударная волна, коллективное рассеяние, индуцированные долговременные отрицательные корреляции, субдиффузия.

ABSTRACT

Kliushnichenko O. V. Induced dissipative interaction and collective scattering in Langmuir lattice gas. — Manuscript.

Thesis for the Doctor of Philosophy degree (Candidate of science in Physics and Mathematics) in speciality 01.04.02 – theoretical physics. — Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2019.

The thesis is devoted to the theoretical study of specific properties of non-equilibrium formations resulting from collective scattering of a gas stream on embedded heavy impurities, and the effects of short-range inter-particle interaction on effective wake-mediated forces between the impurities. The study is focused on dissipative (diffusive) systems and, as a basic model of a medium, makes use of the simple multi-component Langmuir lattice gas model, which is a purely dissipative system, and, at the same time, accounts for strong short-range repulsion that can manifest itself as the blockade effect. This model implies the hopping transport mechanism with activated jumps and is widely used for the description of surface migration of adsorbed atoms, dynamics of super-ionic conductors or diffusion in the bulk of solids.

Passage of impurities through a medium generates a long-living perturbations (wakes), as well as the scattering of the flow of medium particles on “heavy” impurities is accompanied by the perturbations of medium-associated field. The large spatial extent of wakes entails the long-range non-equilibrium correlations or effective interaction between impurities, that leads to their collective behavior, in particular, to the formation of non-equilibrium (dissipative) structures. One of the peculiarities of the induced non-equilibrium interaction is its non-Newtonian character entailed by the dissipative properties of a medium, as, e.g., in diffusive systems. These properties make such systems interesting for scientific research as well as practical applications. One of the main aims of the work is to study the role of short-range inter-particle interaction in gas and its influence, in particular, via the blockade effect, on the behavior of long-range non-equilibrium forces and correlations between impurities, and also on the properties of non-equilibrium structures and collective scattering.

The effect of inversion of wake of an impurity embedded into the gas flow with short-range inter-particle repulsion is shown: increasing of the gas particle concentration leads, via the blockade effect, to the switching of wake structure which takes atypical form with inverted density distribution profile. The wake inversion, obtained numerically for the lattice gas in the local equilibrium approximation, is characterized by the switching of regimes of asymptotic behavior of the wake profile far from an inclusion. The latter was demonstrated by using the long-wavelength and linear flow approximations. In addition, the method of simple layer potential, or the approach of secondary surface sources at the inclusion surface, allowed to introduce consistently the analog of the “polarization” notion for an inclusion, i.e., the induced “charge” at its surface, whose total value is different from zero.

The behavior of induced non-equilibrium interaction between impurities is sensitive to the structure of gas perturbation or wake around them. In particular, it is shown in the work that this interaction is considerably enhanced in case the common non-linear striation-like perturbation “coat” with characteristic domain wall type profile is formed around impurities due to the blockade effect, that can lead to the dissipative pairing effect. These

corresponds to the case of collective scattering of a flow on impurities, which appears at certain values of external field, gas concentration and distance between impurities. At increasing gas concentration the wake inversion leads to sign change of effective interaction. It is shown that for an ensemble of small and widely separated obstacles the dissipative wake-mediated interaction between them belongs to the type of induced dipole-dipole (multi-pole) interaction associated with non-symmetric anisotropic screened Coulomb-like potential. The developed analytical approach allows also to describe the effect of sign change of the induced dissipative interaction depending on gas concentration and mutual spatial alignment of inclusions.

A number of effects of collective scattering for a cloud of impurities exposed to a gas stream are demonstrated. Formation is considered of a common density perturbation and shock waves, both generated collectively by a system of scatterers at sudden application of the stream-inducing external field. Obtained results demonstrate that (i) the scattering of gas stream can be essentially amplified, due to non-linear collective effects, upon fragmentation of a solid obstacle into a cluster of impurities; (ii) a cluster of disordered impurities can produce considerably stronger scattering accompanied by enhanced and accelerated shock wave, as compared to a regularly ordered cluster. It is also shown that the final steady-state density distribution is formed as a residual perturbation left after the shock front passage. In particular, a kink-like steady distribution profile can be formed as a result of shock front stopping effect. The possibility of the onset of solitary structures, reminiscent of precursor-solitons or avalanches, is shown.

Multi-component character of lattice gas entails the presence of additional inter-particle correlations which are manifested most pronouncedly in the case of significant difference in mobilities of components. The induced correlations in slow subsystem, caused and mediated by the fast one, are considered. In the quasi-one-dimensional case and within the adiabatic approximation it is shown, that in the slow subsystem the induced negative long-time correlations appear which are similar to hydrodynamic ones between colloidal particles in the one-dimensional channel.

Another limiting case of the two-component lattice gas, when one of the components is fixed (immobile) and plays the role of the medium, allows to model the diffusive transport in inhomogeneous medium. Based on such approach it is shown that density relaxation in strongly inhomogeneous medium can be accompanied by negative mass-transfer. In addition, the front of a package exhibits hopping-like motion while passing through the region where immobile component is present that causes fragmentation and smearing slow-down of the package. It is shown that behavior of mean-square displacement reflects only the averaged dynamics of the front motion and corresponds to sub-diffusion regime.

The results of the work can be important when considering formation of dissipative structures in the impurity ensemble in strongly non-equilibrium condensed matter. Qualitative correspondence of the properties of non-equilibrium structures, obtained in the work, with that observed in dusty/complex plasmas and colloidal suspensions, allows to exploit developed approaches and models for rough description of such systems.

Key words: lattice gas model, blockade effect, induced dissipative interaction, shock wave, collective scattering, induced long-time negative correlations, sub-diffusion.