Національна академія наук України
Інститут фізики
Національна академія наук України
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Клюшніченко Олександр Вікторович

УДК 538.9

Дисертація
Індукована дисипативна взаємодія та колективне розсіяння в Ленґмюровому ґратковому газі

01.04.02 — теоретична фізика

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

____________ О. В. Клюшніченко

Науковий керівник: Томчук Петро Михайлович, доктор фіз.-мат. наук,
професор, член-кореспондент НАН України

Київ — 2019

АНОТАЦІЯ

Клюшніченко О. В. **Індукована дисипативна взаємодія та колективне розсіяння в Ленґмюровому ґратковому газі.** — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

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

В дисертаційній роботі, в рамках моделі ґраткового газу, продемонстровано та вивчено ряд ефектів, що виникають при розсіянні потоку газу взаємодіючих частинок на домішках, зокрема, в режимі блокади в газі. Показано ефекти інверсії сліду, перемикання знаку дисипативної взаємодії між домішками та її асимптотичної поведінки, 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.

Проходження частинок-домішок через середовище 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 власти-

востями самого середовища: його нелінійністю (наприклад, ефект блокади в газі), типом міжчастинкової взаємодії, наявністю дисипації. 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 Ленґмюрового ґраткового газу, який, з одного боку, являє собою суто дисипативну систему і, в той же час, враховує сильне короткосяжне міжчастинкове відштовхування, що може проявлятись як ефект блокади. Ця модель передбачає активаційний (стрибковий) механізм транспорту і широко використовується для опису поверхневої міграції адсорбованих атомів, динаміки суперйонних провідників чи дифузії в об'ємі твердого тіла.

В першому розділі показано ефект інверсії сліду від включення в потоці газу з короткосяжним міжчастинковим відштовхуванням: при збільшенні концентрації частинок газу нелінійний ефект блокади призводить до перемикання структури сліду, яка при цьому набуває нетипової форми з інвертованим профілем розподілу густини. Інверсія сліду, отримана чисельно для ґраткового газу в наближенні локальної рівноваги, характеризується перемиканням режимів асимптотичної поведінки профілю сліду далеко від включення. Останнє було продемонстровано, використовуючи довгохвильове наближення та наближення лінійного потоку. Крім цього, метод потенціалу простого шару, або метод вторинних джерел на поверхні включення, дозволив послідовно ввести аналог поняття «поляризації» для включення, тобто індукованого «заряду» на його поверхні, сумарна величина якого є відмінною від нуля.

Поведінка індукованої нерівноважної взаємодії між домішками є чутливою до структури збурення газу або сліду навколо них. Зокрема, в роботі показано, що ця взаємодія значно підсилюється у випадку коли навколо домішок завдяки ефекту блокади утворюється спільна нелінійна «шуба» збурення типу страту, з характерним профілем типу доменної стінки, що може призводити до ефекту дисипативного спарювання. Це відповідає випадку колективного розсіяння потоку на домішках, яке виникає при певних значеннях зовнішнього поля, концентрації газу та відстані між домішками. При збільшенні концентрації газу інверсія сліду призводить до зміни знаку ефективної взаємодії.

Для ансамблю малих і далеко рознесених включень показано, що дисипативна взаємодія між ними, опосередкована слідами, належить до типу індукованої диполь-дипольної (мультипольної) взаємодії, яка асоційована з несиметричним анізотропним екранованим кулонівським «потенціалом». Розвинений аналітичний підхід дозволяє також описати ефект зміни знаку індукованої дисипативної взаємодії в залежності від концентрації газу і від взаємного розташування включень-домішок у просторі.

В роботі продемонстровано ряд ефектів колективного розсіяння для хмари домішок в потоці газу, зокрема, в третьому розділі розглядається формування спільного збурення густини та ударних хвиль, які породжені колективно системою розсіювачів при раптовому «ввімкненні» зовнішнього поля (яке створює потік). Отримані результати показують, що (i) розсіяння потоку газу може значно підсилюватися, за рахунок нелінійних колективних ефектів, при гетерогенній фрагментації цілого включення на кластер домішок; (ii) кластер з випадково неоднорідним розподілом домішок може створювати суттєво сильніше розсіяння супроводжуване підсиленням та прискоренням ударної хвилі, порівняно з регулярно впорядкованим кластером. Також показано, що стаціонарний розподіл густини формується як залишкове збурення, що залишається після проходження ударної хвилі. Зокрема, формування стаціонарного розподілу з профілем виду доменної стінки може бути спричинене ефектом зупинки ударної хвилі. Показана можливість генерації солітоноподібних структур, що нагадують солітони-передвісники або лавини.

Полікомпонентність ґраткового газу обумовлює наявність додаткових міжчастинкових кореляцій, які проявляються найбільш виражено у випадку значної різниці рухливостей компонент. В четвертому розділі розглядаються індуковані кореляції в повільній підсистемі, зумовлені і опосередковані швидкою підсистемою. У квазіодновимірному випадку та в рамках адіабатного наближення продемонстровано, що в повільній підсистемі виникають індуковані від'ємні довгочасні кореляції, подібні до гідродинамічних кореляцій між колоїдними частинками в одновимірному каналі.

Інший граничний випадок двокомпонентного ґраткового газу, коли одна з компонент є нерухомою і відіграє роль середовища, дозволяє змоделювати дифузійний транспорт в неоднорідному середовищі. На основі такого підходу вдалося показати, що релаксація густини в сильнонеоднорідному середовищі може супроводжуватись від'ємним масоперенесенням. Продемонстровано стрибкоподібний рух положення фронту пакета з проходженням через області присутності іншої компоненти, що призводить до фрагментації і сповільнення розпливання пакета. Показано, що поведінка середньоквадратичного відхилення, на відміну від руху фронту, відображає лише усереднену динаміку і задовольняє режиму субдифузії.

Результати роботи можуть мати важливе значення при формуванні дисипативних структур в ансамблі домішок в сильнонерівноважних конденсованих середовищах. 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.

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

Список публікацій здобувача:

журнальні публікації:

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. Spec. Top. — 2013. — Vol. 216. — P. 127.
3. *Клюшниченко А. В.* Эффект блокады и концентрационное переключение «направления» следа включения в решеточном газе / А. В. Клюшниченко, 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).

тези конференцій:

6. *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.

7. *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.
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.

ABSTRACT

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

Thesis for the Candidate of Science in Physics and Mathematics degree in speciality 01.04.02 — "theoretical physics". — Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine. — Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kiev, 2019.

In this thesis an array of effects arising under interacting gas stream scattering on impurities, in particular, in the blockade regime in a gas, are demonstrated and studied within the lattice gas model. The effects of wake inversion, sign change of the dissipative interaction between impurities and switching of its asymptotic behavior, the shock wave enhancement and stopping effects, collective scattering enhancement, and also effects of negative correlations, negative mass-transfer and hopping-like sub-diffusion in inhomogeneous media.

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. The properties of the perturbations themselves and of the effective non-equilibrium interaction they cause are determined by the mechanism of energy loss in the system "medium-impurity" and by the properties of medium itself: its non-linearity (e.g., the blockade effect in a gas), interparticle interaction type, the presence of dissipation. 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

purely 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 interparticle 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.

For this reason, as a basic model of a medium, this work uses the simplest multi-component Langmuir lattice gas model which, on the one hand, is a purely dissipative system and, at the same time, accounts for strong short-range repulsion that cam 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.

In the first chapter, 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 in the work, in particular, in the third chapter, 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. In the fourth chapter, 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 was possible to show that density relaxation in strongly inhomogeneous medium can be accompanied by negative mass-transfer. It is demonstrated that front of a package exhibits hopping-like motion while passing through the regions 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.

List of publications of applicant:

journal publications:

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. Spec. Top. — 2013. — Vol. 216. — P. 127.
3. *Kliushnychenko O. V.* Effect of the blockage and concentration switching of the «direction» of the trace of an inclusion in a lattice gas / O. V. Kliushnychenko, S. P. Lukyanets // J. Exp. Theor. Phys. — 2014. — Vol. 118, № 6. — P. 976.
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).

conference abstracts:

6. *Lukyanets S. P.* Effects of Anomalous Diffusive Transport Caused by Particle Distinguishability / S. P. Lukyanets, O. V. Kliushnychenko // Book of Abstracts. 3^{rd} 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. 3^{rd} 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. 4^{th} 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 // 30^{th} Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics (3–8 September 2017, Kraków, Poland). — P. 33.

ЗМІСТ

ВСТУП

Актуальність теми. Рух частинок-домішок через середовище (рідина, газ, тверде тіло чи ін.) призводить до його збурення, наприклад, збурення його густини, що може проявлятися у вигляді слідів (*wake*), залишених домішками. Аналогічно, розсіяння потоку частинок середовища або пучка на включеннях («важких» домішках) супроводжується збуреннями поля, яким описується середовище. В свою чергу, такі збурення-сліди, впливають на інші домішки, індукуючи нерівноважні кореляції чи ефективну взаємодію між ними (*wake-mediated interaction*) і, як наслідок, призводять до їх колективної поведінки та організації нерівноважних, зокрема, дисипативних структур. В різних фізичних системах збурення може проявлятися як черенковське випромінювання, утворення турбулентного сліду, вихорів, локальних фазових перетворень, та є властивим як для класичних середовищ, наприклад, в гідродинаміці [1–4], оптиці [5], твердому тілі [6], феромагнітних системах [7], рідких кристалах, (запорошеній) плазмі [8–10], колоїдних суспензіях (активна/пасивна мікро-реологія [11, 12]), так і для квантових, наприклад, для бозе-конденсату [13–16] чи квантової рідини [17]. Характеристики збурень, так само як 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, наявністю дисипації.

Поведінка ефективної нерівноважної взаємодії визначається, головним чином, властивостями та структурою сліду і є чутливою до змін його форми, зокрема, до формування спільного сліду двох домішок та до нелінійних ефектів у газі, таких як ефект блокади (локальне екранування потоку газу). Ключова властивість збурень-слідів — це їх велика протяжність [7, 17–24]: як в просторовому масштабі, так і довготривалість у часі, що свідчить про наявність довгочасних кореляцій в системі і характеризує пам'ять середовища про проходження домішки. Це властиво, зокрема, для дифузійних слідів в середовищах з дисипацією. Довготривалі сліди окремих домішок зумовлюють, відповідно, *далекосяжну* індуковану дисипативну взаємодію між домішками. У випадку броунівського середовища такі сили між домішками часто називають нерівноважними силами збіднення (*depletion force*) чи ентропійними силами [25–29]. Дійсно, в рівновазі сили збіднення мають короткосяжний характер: їх характерний масштаб відповідає типовому радіусу міжчастинкової взаємодії в середовищі [30–33]. В протилежність, для нерівноважних сил збіднення, як просторовий масштаб так і величина цих сил можуть суттєво зростати порівняно з рівноважною [32, 33] або пружною взаємодією через поле середовища. Друга важлива властивість таких сил — це їх неньютонів характер (формально, порушення третього закону Ньютона) [8, 9, 25, 28, 34–38]. Останнє, як правило, зумовлено дисипативними властивостями середовища, наприклад, в суто дисипативних (дифузійних) системах, або ж просто пояснюється несиметричним характером слідів. Всі ці властивості роблять такі системи цікавими як з точки зору наукових досліджень так і в плані їх практичних застосувань, нарівні з іншими відомими прикладами нерівноважних ефективних взаємодій, такими як гідродинамічні взаємодії [39–41], нерівноважні флуктуаційно індуковані (*Casimir-like*) сили [42–44], нерівноважні взаємодії між домішками в рідких кристалах, ін.

Формування нерівноважних структур та поведінка опосередкованих ними ефективних взаємодій є актуальною проблемою фізики конденсованих середовищ. Зокрема, в роботах кількох останніх років [8, 9, 34, 35, 37] було передбачено, що така індукована дисипативна взаємодія може призводити до організації нерівноважних структур з ближнім чи дальнім порядком в ансамблях домішок та до ефекту *дисипативного спарювання* між домішками [45, 46], обумовленого дифузійними слідами. Причому, саме неньютонів характер взаємодії відповідає за т. зв. *дисипативний спінодальний розпад* в бінарних системах [34, 35] та обумовлює організацію нових екзотичних фаз, коли система домішок починає поводити себе як активний плин [8].

В переважній більшості робіт, які прямо чи опосередковано стосуються властивостей індукованої дисипативної взаємодії, розгляд обмежується або наближенням лінійного відгуку, яке не дає коректного опису несиметричної структури сліду, і як наслідок нерівноважної взаємодії, або наближеннями малої густини частинок середовища, коли можна знехтувати нелінійними ефектами середовища (напр., міжчастинкова взаємодія в газі), чи малої концентрації домішок [47, 48], коли характер їх розподілу в просторі (нерегулярний/впорядкований) не проявляється. Однак, відомо, що наявність навіть найпростішої короткосяжної міжчастинкової взаємодії типу жорстких корів призводить до цілого ряду кінетичних ефектів [23, 24, 49–52], зокрема, до ефектів блокади, які відповідають, наприклад, за формування дрейфівних просторових структур [50], нерівноважних структур [53, 54] або страт [55–57] в (запорошеній) плазмі.

При розгляді як пружних так і нерівноважних взаємодій, індукованих збуреннями середовища, зазвичай, обмежуються розглядом двох частинок або домішок, наприклад, ефект дисипативного спарювання між трейсерами в газі [45] або між колоїдними частинками в суспензії [11, 12]. В той же час, як добре відомо [58, 59], в ансамблі домішок неможливо виділити взаємодію між двома окремими домішками без наявності впливу інших. Це пов'язано з ефектом колективного розсіяння пучка або ансамблю, яке може значно перевищувати звичайний адитивний вклад в розсіяння окремих домішок, що в свою чергу може призводити до значного підсилення або пригнічення як амплітуди розсіяння, загальної сили опору, так і до гігантських флуктуацій локальної індукованої нерівноважної взаємодії між самими домішками всередині пучка, або їх ансамблю. Як приклад, це взаємодія пучка іонів з мішенню [60], колективне черенковське випромінювання, колективне радіаційне тертя, інше. З цього приводу, значний інтерес викликає проблема підсилення колективного розсіяння в умовах сильної нелінійності мішені або середовища, коли колективне розсіяння визначається саме наявністю нелінійності середовища. Наприклад, коли ефект блокади призводить до формування в газі поблизу кластера або пучка структур, які починають виконувати роль додаткових розсіювачів.

Нелінійні ефекти середовища, зокрема газу, такі як ефекти блокади чи локалізації частинок потоку (напр. дрейфівні просторові структури [50, 51, 61, 62] і т. п.), як відомо [63], слабо залежать від характеру міжчастинкового відштовхування і, як правило, спостерігаються навіть в найпростішому наближенні «твердих сфер». В той же час, властивості довготривалої пам'яті та далекосяжної нерівноважної взаємодії між домішками характерні і для простих дифузійних систем, особливо, неньютонів характер сил ефективної взаємодії, який є притаманним саме дисипативним (дифузійним) системам [25, 28, 38].

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 — довготривалих слідів і колективного розсіяння.

У зв'язку з цим, в якості основної моделі середовища, в даній роботі використовується найпростіша модель багатокомпонентного Ленґмюрового ґраткового газу, який, з одного боку, являє собою суто дисипативну систему і, в той же час, враховує сильне короткосяжне міжчастинкове відштовхування, що може проявлятись як ефект блокади. Ця модель передбачає активаційний (стрибковий) механізм транспорту і широко використовується для опису поверхневої міграції адсорбованих атомів [64, 65], динаміки суперйонних провідників [50] чи дифузії в об'ємі твердого тіла [66].

В дисертаційній роботі, в рамках даної моделі були продемонстровані та вивчені ряд ефектів, що виникають при розсіянні потоку газу на ансамблі домішок, обумовлених 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 матеріалів 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 невпорядкованості 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 Ленґмюрового ґраткового 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 отриманих результатів. В дисертаційній роботі отримано наступні результати:

1. Продемонстровано ефект інверсії сліду від включення в потоці газу з короткосяжним міжчастинковим відштовхуванням. На прикладі моделі ґраткового Ленґмюрового 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 концентрації газу.
3. Показано, що у випадку ансамблю малих, далеко рознесених включень, дисипативна взаємодія має форму індукованої диполь-дипольної взаємодії, що описується анізотропним екранованим потенціалом типу кулонівського. Отримані аналітичні вирази якісно описують ефективну взаємодію між включеннями та пояснюють ефект її перемикання 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 екранування потоку газу, зокрема ефекту блокади:
   - 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, показано, що 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 сильнонеоднорідному 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, перемикання дисипативної взаємодії та дисипативного спарювання, виявлені в роботі, можуть бути визначальним фактором при формуванні дисипативних структур в ансамблі домішок в сильнонерівноважних 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 міґрації адсорбованих атомів по поверхні твердого тіла (електроміґрація) 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 приймав 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 [49], здобувач звернув увагу на можливість ефекту локального «від'ємного» масоперенесення, що супроводжує дифузійний транспорт в сильнонеоднорідному середовищі, та виконав відповідні чисельні розрахунки.

В роботі [67] здобувач виконав аналітичні розрахунки та отримав вираз для кореляційної функції швидкостей.

В роботі [68] 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 [69] 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 [70] 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 матеріалів дисертації. Матеріали роботи було представлено на наукових семінарах відділу теоретичної фізики Інституту фізики НАН України, відділів синергетики та теорії квантових процесів у наносистемах Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, 42-й підсумковій науковій конференції Інституту фізики НАН України (2017 р.); окремі результати доповідалися на міжнародних конференціях та симпозіумах:

- 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics (QEDSP2011), 29 August – 2 September 2011, Kharkov, Ukraine
- 4th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applica-

tions, 3–6 July 2012, Lviv, Ukraine

- Bogolyubov Conference Problems of Theoretical Physics, 24–26 May 2016, BITP, Kyiv, Ukraine
- 30$^{\text{th}}$ Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, 3–8 September 2017, Kraków, Poland

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається із анотації, вступу, чотирьох розділів основної частини з 29 рисунками, висновків, переліку посилань зі 128 найменувань та двох додатків. Кожен розділ основної частини закінчується висновками, у яких сформульовані основні результати, отримані в розділі. Повний об'єм дисертації становить 154 сторінки, перелік посилань займає 14 сторінок.

РОЗДІЛ 1
КОНЦЕНТРАЦІЙНА ІНВЕРСІЯ СЛІДУ — «ХВІСТ ВПЕРЕД» ТА РОЛЬ ЕФЕКТУ БЛОКАДИ В ГАЗІ

1.1 Вступ

Коли швидкість пробної частинки мала, наприклад, менша швидкості звуку, і можна знехтувати гідродинамічними ефектами, слід описується в дифузійному наближенні [71]. Тут ми будемо цікавитися дифузійним слідом від включення в броунівському газі частинок за наявності короткосяжного відштовхування між ними.

Особливістю дифузійного сліду є його велика просторова і часова протяжність, яка характеризує пам'ять середовища про проходження включення [7,17–24]. Зазвичай, просторово-часове загасання збурення середовища позаду включення чи пробної частинки має степеневий характер, що є типовим для багатьох систем [4,17,24].

Збурення густини газу (слід) визначає силу тертя або дисипативну силу, що діє на включення. У випадку двох і більше включень наявність довгочасного сліду, який вони залишають при русі, призводить до довгочасних кореляцій [39–41,67] та далекосяжної дисипативної взаємодії між ними, котру іноді також називають *нерівноважною силою збіднення* [11,12,25,29,45,72]. В свою чергу, ця взаємодія відіграє ключову роль при формуванні дисипативних структур.

Наявність кореляцій чи взаємодії між частинками газу призводить до цілого ряду незвичних кінетичних ефектів, наприклад, дрейфівні просторові структури [50,51], від'ємна дифузія [49,73,74], довгочасні від'ємні кореляції [39,41,67]. Навіть за наявності короткосяжних кореляцій між частинками, як наприклад в ґратковому газі, коли кожен вузол може бути окупований лише одною частинкою, стохастична динаміка пробної частинки демонструє просторово-часовий ефект пам'яті [52], а за наявності зовнішнього поля відповідає супердифузійному режиму [23, 24].

В цьому розділі основну увагу буде приділено особливостям структури сліду, який виникає за розсіяння потоку газу на *окремій* домішці та при наявності короткосяжного відштовхування між частинками газу. Ми розглянемо формування компактних структур щільного газу поблизу домішки, які виникають за рахунок ефекту блокади і подібні до страт, що утворюються поблизу войду в запорошеній плазмі. Будуть розглянуті характерні асимптотики сліду (загасання збурення густини в просторі), які вдається отримати в лінійному наближенні. Також буде показано, використовуючи метод вторинних поверхневих джерел, що можливо ввести поняття поляризації домішки або її індукованого дипольного моменту, асоційованого з несиметричним екранованим кулонівським «потенціалом», який взагалі є непарною Ґріновою функцією. Також ми покажемо можливість концентраційних перетворень сліду — його інверсії. Забігаючи наперед, зазначимо, що саме структура збурення густини (сліду) при розсіянні буде визначати особливості індукованої потоком нерівноважної взаємодії між домішками.

Для того щоб продемонструвати ці властивості, обумовлені ефектом блокади, скористаємось найпростішою моделлю ґраткового газу з умовою виключеного об'єму, коли вузол може бути окупований лише одною частинкою і, для простоти, розглянемо макроскопічне включення (в загальному випадку, проникне), розміри якого набагато більші сталої ґратки. Щоб описати нерухоме включення, що знаходиться в потоці ґраткового газу (зумовленому дією зовнішнього постійного поля $\mathbf{G}$) та послідовно ввести «взаємодію» між ним та частинками газу, ми звернемось до моделі двокомпонентного ґраткового газу. В граничному випадку, коли рухливість частинок одної з компонент спрямована до нуля і її можна вважати статичною, кінетика швидкої компоненти описує дифузію частинок в неоднорідному середовищі. Неоднорідність визначається розподілом статичної компоненти, а характер взаємодії частинок швидкої компоненти з неоднорідністю описується редукованим змішувальним потоком, див. [49] та пункт 4.2. В такому наближенні включення задається як локалізований кластер статичної компоненти.

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 (див., наприклад, [52, 64, 75]):

$$n_i^\alpha(t + \Delta t) - n_i^\alpha(t) = \sum_j \left(J_{ji}^\alpha - J_{ij}^\alpha\right) + \delta J_i^\alpha. \tag{1.1}$$

Тут $n_i^\alpha = 0, 1$ — локальні числа заповнення i-го вузла частинками сорту α, $J_{ij}^\alpha = \nu_{ij}^\alpha n_i^\alpha \left(1 - \sum_\beta n_j^\beta\right) \Delta t$ — середня кількість стрибків частинок α з i-го на сусідній j-й вузол за час Δt, $\beta(\alpha) = 1, 2$ — сорт частинок, а $\nu_{ij}^\alpha = \nu^\alpha$ 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 [64, 75]. Ці флуктуації зумовлені швидкими, порівняно з часами Δt, процесами, якими для простоти ми будемо нехтувати.

Якщо частота стрибків частинок одного сорту (n^1) мала, $\nu_{ij}^1 \to 0$, 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 $\nu_{ji} = \nu = \mathrm{const}$. Наявність зовнішнього рушійного поля призводить до асиметрії стрибків частинок. Вважаючи механізм стрибків активаційним, а поле $\mathbf{G}$ — малим, частоту стрибків можна представити у вигляді $\nu_{ji} \approx \nu[1 + (\mathbf{G}, \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/(2kT)]$, або $\nu^{\pm} \approx \nu \pm \delta\nu$, де ν^+ позначає частоту стрибків вздовж поля, ν^- — проти поля, $\delta\nu = \nu\ell|\mathbf{G}|/(2kT)$ (ℓ — стала ґратки) і припускається, що $\ell|\mathbf{G}|/(2kT) < 1$.

Ми будемо використовувати наближення локальної рівноваги [64,75,76], яке в нашому випадку формально співпадає з наближенням середнього поля [77]. Ввівши часову похідну [78], можна перейти від рівняння (1.1) до рівняння на середні числа заповнення вузлів

$$\partial_t \langle n_i \rangle = \sum_j (\langle J_{ji} \rangle - \langle J_{ij} \rangle), \qquad \langle J_{ji} \rangle = \nu_{ji} \langle n_j \rangle (1 - \langle n_j \rangle - u_i), \tag{1.2}$$

де $\langle n_i \rangle = \langle n(\mathbf{r}_i) \rangle \in [0, 1]$ описує середні числа заповнення на вузлах $\mathbf{r}_i$, а $n_0 \equiv n(|\mathbf{r}| \to \infty)$ — рівноважна концентрація газу. Дані рівняння ми будемо використовувати для чисельних розрахунків.

Для аналітичних оцінок ми будемо користуватися довгохвильовим наближенням (див. [49–51, 61, 62]). В континуальному ліміті макроскопічна кінетика мобільної компоненти n описується рівнянням[1]

$$\dot{n} = \nabla^2 n - \boldsymbol{\nabla}(u \boldsymbol{\nabla} n - n \boldsymbol{\nabla} u) - (\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\nabla})[n(1 - u - n)], \tag{1.3}$$

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 $\mathbf{r}/\ell \to \mathbf{r}$ та час $\tau = \nu t$.

Якщо друга компонента теж мобільна, $u = u(\mathbf{r}, t)$, рівняння на неї має вигляд аналогічний (1.3). В такому випадку доданок $\boldsymbol{\nabla}(u \boldsymbol{\nabla} n - n \boldsymbol{\nabla} u)$ відповідає за змішування двох компонент газу, тобто за ефекти захоплення (потоком одної компоненти іншої) та від'ємного масоперенесення. Нелінійний дрейфовий доданок $(\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\nabla})[n(1 - u - n)]$ відповідає за ефект блокади.

[1]Зазначимо, що рівняння виду (1.3), в тому числі їх узагальнення на дво- і багатокомпонентні системи, також виникають в задачах нелінійної крос-дифузії [79], дифузії реагентів в моношарах на поверхні каталізатора [80], а також слугують моделлю швидких йонних провідників [50].

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 (1.3) дозволяє адекватно ввести умови зшивки. При цьому, як ми побачимо далі, на межі домішки розриву зазнає не лише нормальна похідна густини газу, але й саме поле густини $n(\mathbf{r})$. Крім того, використання двокомпонентної моделі дає змогу ввести середню (ефективну) проникність домішки $u(\mathbf{r}) \in [0, 1]$ для частинок 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 (1.1), ми не враховуємо флуктуаційно індуковані (Casimir-like) сили [42, 44, 81–85], 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» (див., наприклад, [45, 52]), які повинні виникати біля поверхонь включень (тобто поблизу іншої компоненти газу).

1.2 «Перемикання» форми профілю (інверсія сліду)

Ми почнемо розгляд з досить неочікуваного на наш погляд ефекту — концентраційної інверсії форми сліду. Звично, слід чи профіль збурення концентрації газу при русі включення має характерну структуру — зі щільною локалізованою областю газу перед включенням та протяжним збідненим хвостом позаду нього, що загасає згідно степеневого закону. В ґратковому газі слід від пробної частинки загасає як $|\mathbf{r}|^{-2} \ln |\mathbf{r}|$ в тривимірному або як $|\mathbf{r}|^{-3/2}$ в двовимірному випадку [18–22]. В наступному пункті розділу буде показано, що слід, породжений включенням в потоці того ж ґраткового газу, може бути розташований не як звично позаду включення, а перед ним. Точніше, структура збурення може мати вигляд, що характеризується щільною протяжною областю перед включенням та локалізованою областю збіднення позаду нього. Причому, поява такої інверсної структури «хвіст вперед» стає можливою коли рівноважна концентрація газу стає вищою критичної $(1/2)$, тобто має місце концентраційне «перемикання» сліду. Така незвична форма профілю зумовлена ефектом блокади частинок ґраткового газу перед включенням, що є можливим за наявності потоку та високої концентрації.

Розглянемо двовимірний ґратковий газ зі статичним круглим (радіус $R \gg \ell$) включенням, яке задане розподілом «важкої» компоненти $u(\mathbf{r})$, Рис. 1.1. Стаціонарний розподіл концентрації мобільних частинок ґратко-

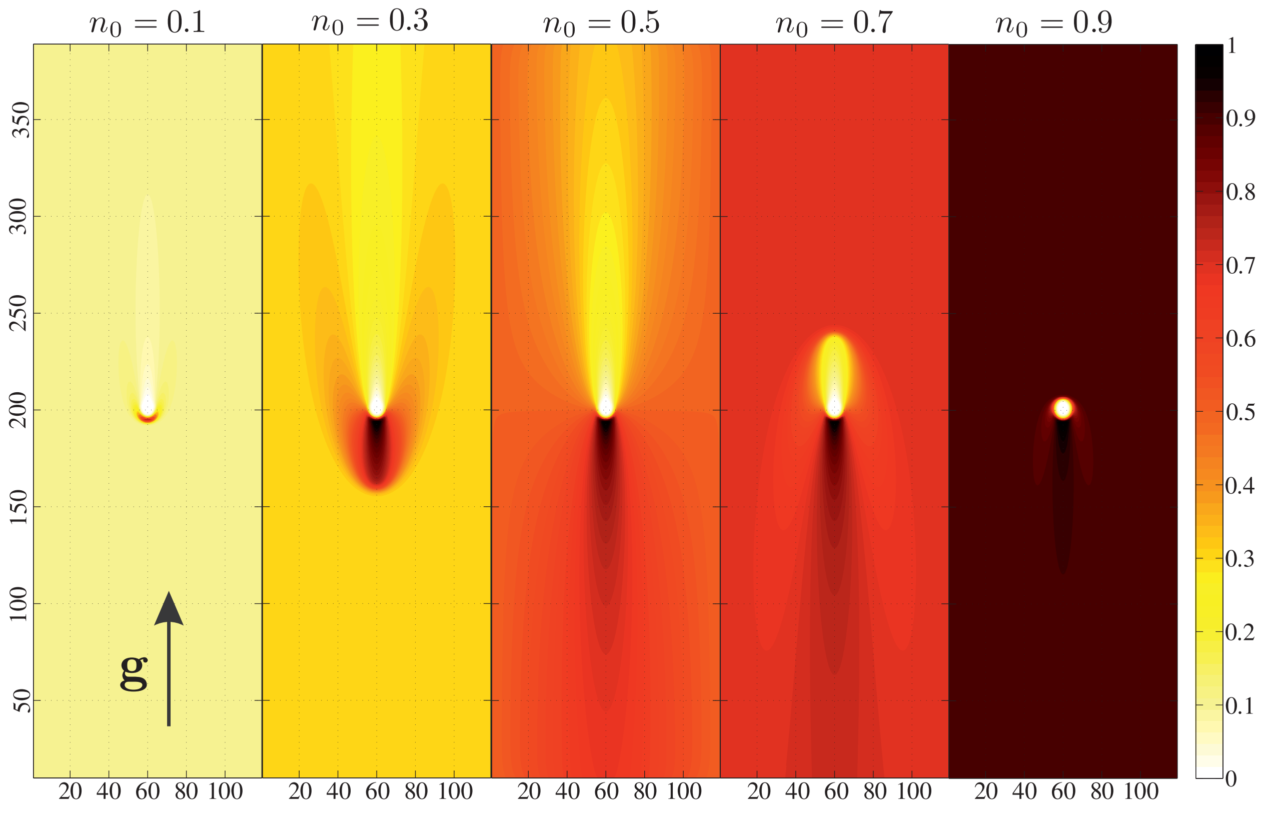


Рис. 1.1. Приведені двовимірні стаціонарні розподіли концентрації (середніх чисел заповнення) частинок газу $\langle n(x_i, y_i)\rangle$ демонструють інверсію структури сліду при збільшенні рівноважної концентрації частинок газу n_0. Зовнішнє поле $|\mathbf{g}| = 0.5$ направлене вздовж OX, кругле непроникне $(\bar{u} = 1)$ включення з радіусом $R = 7\ell$ розташовано в центрі.

вого газу при обтіканні включення для різних значень рівноважної концентрації n_0 приведено на Рис. 1.1 та 1.2. Дані розподіли отримані чисельно для середніх чисел заповнення вузлів квадратної ґратки на основі рівняння (1.2). За низьких концентрацій ($n_0 < 1/2$) профіль має типову структуру [24, 25] та характеризується наявністю протяжної збідненої області за включенням (слід) і локалізованої щільної області перед ним, Рис. 1.1*а*. 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. 1.2*в*.

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. Формування щільної області перед включенням пов'язане з гальмуванням частинок. Міжчастинкове відштовхування призводить до режиму блокади, газ стає нестисним перед включенням, що фактично означає ефективне зростання розмірів 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 рівноважній концентрації газу $n_0 = 0.5$ система демонструє симетричні відносно включення протяжні області високої та низької густини частинок ґраткового газу, Рис. 1.1*в* та Рис. 1.2*б*. Як легко помітити з Рис. 1.1, при малих ($n_0 < 0.5$) та при великих ($n_0 > 0.5$) значеннях рівноважної концентрації, області блокади і розрідження поблизу включення зеркально симетричні. Наявність такої симетрії (інверсії) легко показати, використовуючи рівняння (1.3), переписавши його у вигляді

$$\dot{n} = \boldsymbol{\nabla} \cdot (h\boldsymbol{\nabla} n - n\boldsymbol{\nabla} h - \mathbf{g}nh), \tag{1.4}$$

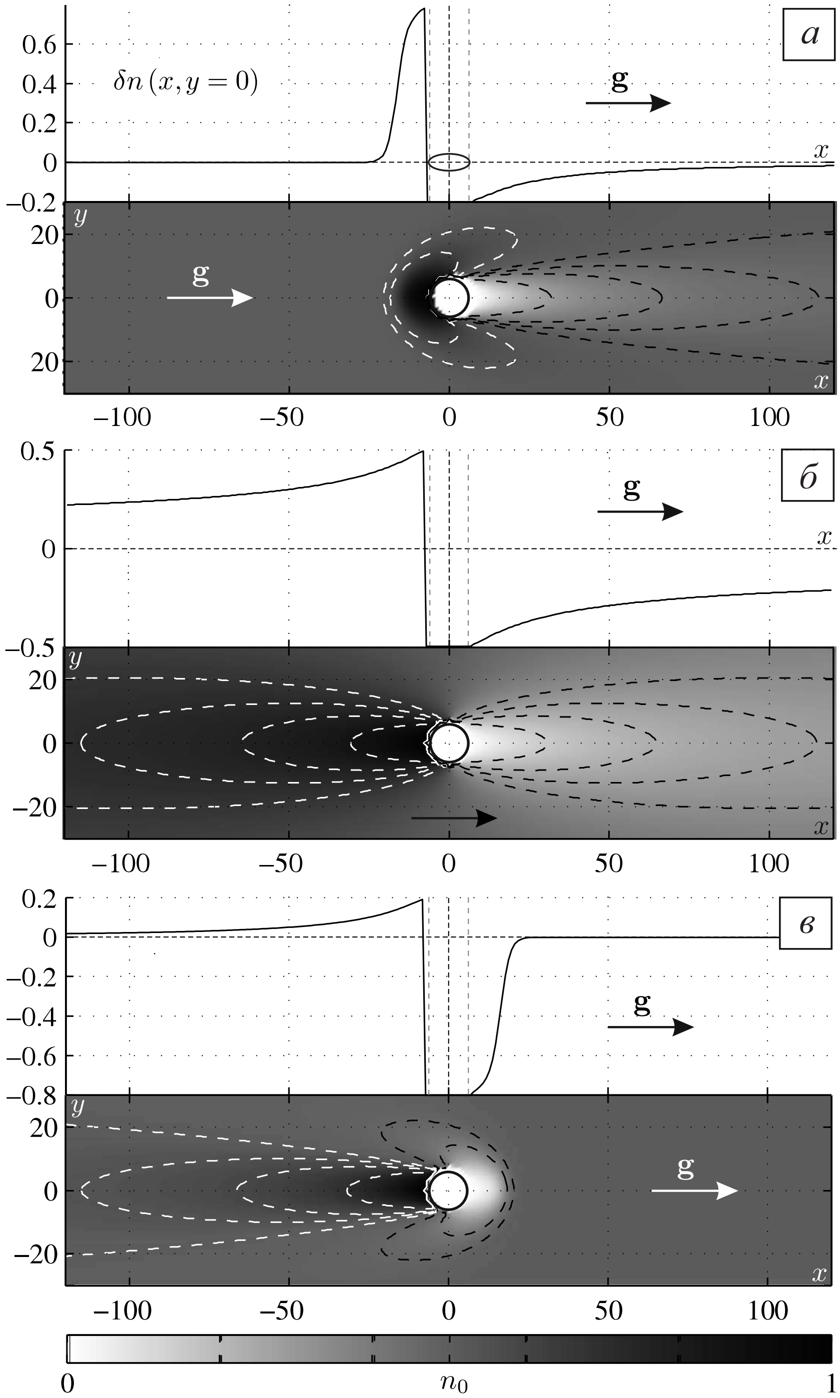


Рис. 1.2. Стаціонарний розподіл концентрації (середніх чисел заповнення) частинок газу $\langle n(x_i, y_i)\rangle$ при різних значеннях рівноважної концентрації n_0: (a) $n_0 = 0.2$, ($б$) $n_0 = 0.5$, ($в$) $n_0 = 0.8$. Зовнішнє поле $|\mathbf{g}| = 0.5$ направлене вздовж OX, непроникне включення ($\bar{u} = 1$) з радіусом $R = 7$ сталих ґратки розташовано в центрі. На всіх рисунках сірий колір фону відповідає рівноважній концентрації газу n_0.

де $h = 1 - n - u$ описує концентрацію вакансій, тобто пустих вузлів. Рівняння (1.4) є інваріантним відносно заміни $n \leftrightarrow h$, $\mathbf{g} \leftrightarrow -\mathbf{g}$. Це означає, що (1.4) можна записати як

$$\dot{h} = \boldsymbol{\nabla} \cdot (n\boldsymbol{\nabla} h - h\boldsymbol{\nabla} n + \mathbf{g}nh). \tag{1.5}$$

Рівняння (1.4) описує кінетику частинок ґраткового газу з рівноважною концентрацією n_0 за наявності зовнішнього поля $\mathbf{g}$, в той час як рівняння (1.5) відповідає кінетиці вакансій з рівноважною концентрацією $h_0 = 1 - n_0$ в протилежно направленому рушійному полі $-\mathbf{g}$. Якщо слід від включення в потоці частинок газу характеризується областю розрідження позаду нього, то слід в потоці вакансій характеризується областю розрідження вакансій, тобто щільною областю частинок газу позаду включення (відносно напрямку потоку вакансій).

Таке концентраційне «обернення» сліду має місце для довільного розподілу домішок. В нашому випадку центрально симетричного 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 $1 - n_0$:

$$\delta n(x, y; 1 - n_0) = -\delta n(-x, y; n_0). \tag{1.6}$$

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. 1.2(б).

Для розподілу $u(\mathbf{r})$ із зеркальною симетрією вздовж напрямку поля $\mathbf{r}_\parallel \parallel \mathbf{g}$, тобто $u(\mathbf{r}_\parallel) = u(-\mathbf{r}_\parallel)$, кожен профіль розподілу густини $\delta n(\mathbf{r}, n_0) = n(\mathbf{r}, n_0) - n_0$ при заданій концентрації n_0 можна отримати шляхом перетворення інверсії профілю $\delta n(\mathbf{r}, 1 - n_0)$ при концентрації $1 - n_0$, що виражається співвідношенням

$$\delta n(\mathbf{r}_\parallel + \mathbf{r}_\perp; 1 - n_0) = -\delta n(-\mathbf{r}_\parallel + \mathbf{r}_\perp; n_0), \tag{1.7}$$

$\mathbf{r}_{\parallel}$ та $\mathbf{r}_{\perp}$ — це поздовжня та поперечна компоненти $\mathbf{r}$, по відношенню до зовнішнього поля $\mathbf{g}$.

Іншими словами, при збільшенні концентрації відбувається інверсія сліду від розрідженого довгого хвоста позаду включення (за малої концентрації газу), до «щільного довгого хвоста» перед включенням (при великій концентрації частинок газу (малій концентрації вакансій).

1.3 Метод вторинних поверхневих джерел: «поляризація» домішки, асоційована з несиметричним (анізотропним) екранованим кулонівським «потенціалом»

Симетрія рівняння (1.3) дозволила нам якісно пояснити інверсію сліду, отриману чисельно для ґраткового газу в наближенні середнього поля, Рис. 1.2. Тут ми розглянемо асимптотичну поведінку збурення густини газу на великій відстані від включення, використовуючи лінійне наближення для дрейфового потоку в рівнянні (1.3). Дане наближення дозволяє, хоч і досить грубо, пояснити концентраційне перемикання сліду як неперервний перехід між різними асимптотичними режимами. Скорочення області збіднення позаду частинки при збільшенні концентрації n_0 відповідає переходу від степеневої асимптотичної поведінки, яка описує протяжний слід, Рис. 1.2*а*, до експоненційної, що характеризує локалізацію області розрідження, Рис. 1.2*в*. В той же час, асимптотика поведінки області підвищеної густини перед включенням зазнає переходу від експоненційного до степеневого режиму.

Щоб це показати, скористаємось довгохвильовим наближенням (1.3) і розглянемо стаціонарну задачу:

$$\boldsymbol{\nabla}[(1-u)\boldsymbol{\nabla}n + n\boldsymbol{\nabla}u] - (\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\nabla})[n(1-u-n)] = 0, \qquad (1.8)$$

де розподіл $u(\mathbf{r})$ задає включення, а $n(\mathbf{r})$ описує розподіл густини газу.

Далі нам буде зручно перейти до нової функції

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{n(\mathbf{r})}{1 - u(\mathbf{r})}, \tag{1.9}$$

рівняння для якої має вигляд:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \{\varepsilon\,[\boldsymbol{\nabla}\psi - \psi\,(1-\psi)\,\mathbf{g}]\} = 0, \tag{1.10}$$

де $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r}) = [1 - u(\mathbf{r})]^2$ і вважається, що $u(\mathbf{r}) \neq 1$.

Звернемо увагу на деякі особливості рівняння (1.10) порівняно з рівнянням (1.8). По-перше, за відсутності зовнішнього поля, рівноважний розподіл ψ є однорідним та співпадає з рівноважною концентрацією газу, $\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 = n_0 = \mathrm{const}$, в той час як рівноважний розподіл $n(\mathbf{r}) = n_0[1-u(\mathbf{r})]$. По-друге, при розгляді включення з різкою межею, рівняння (1.10) допускає розв'язок у класі неперервних функцій, в той час як для рівняння (1.8) як розподіл $n(\mathbf{r})$ так і його нормальна похідна зазнає стрибка на межі включення. Ми будемо розглядати включення у вигляді обмеженого у просторі, однорідного, в загальному випадку проникного, кластера з середньою концентрацією u_0:

$$u = u(\mathbf{r}) = \begin{cases} \bar{u}, & |\mathbf{r}| \leqslant R, \\ 0, & |\mathbf{r}| > R, \end{cases} \tag{1.11}$$

де R — радіус включення.

Нелінійний доданок в (1.10) описує дрейфовий потік, що відповідає за режим блокади частинок газу. Цей нелінійний ефект є суттєвим поблизу включення. На великих відстанях від включення розподіл $\psi(\mathbf{r})$ повинен мало відрізнятись від рівноважного $\psi_0 = n_0$. Останнє дозволяє представити розв'язок $\psi(\mathbf{r}) \approx \psi_0 + \delta\psi(\mathbf{r})$ як мале відхилення $\delta\psi(\mathbf{r})$ від рівноважного розподілу ψ_0. Тут ми скористаємося цим наближенням, щоб якісно описати асимптотичну поведінку розподілу густини газу далеко від включення, розуміючи, що наближення лінійного дрейфового потоку призводить до невірних результатів поблизу самого включення. Зазначимо, що це лінійне наближення працює тим краще, чим менший розмір включення. При збільшенні розміру включення посилюється накопичення частинок газу перед ним, тобто посилюється ефект блокади.

Лінеаризуючи рівняння (1.10), нехтуючи доданком з $\delta\psi^2$, приходимо до рівняння

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\boldsymbol{\nabla}\delta\psi^{\pm}(\mathbf{r}) - 2\mathbf{q}\delta\psi^{\pm}(\mathbf{r}) - \mathbf{Q}\right] = 0. \tag{1.12}$$

Тут $\mathbf{Q} = n_0(1-n_0)\mathbf{g}$ і $\mathbf{q} = (1/2 - n_0)\mathbf{g}$, а саме рівняння описує збурення густини газу всередині ($\delta\psi^-$) та ззовні включення ($\delta\psi^+$) відносно його стаціонарного розподілу ψ_0. Рівняння (1.12) доповнені умовами зшивки для $\delta\psi^{\pm}$ на межі включення S:

$$\begin{aligned} \delta\psi^+ = \delta\psi^-,\ \varepsilon^+ \left[\left(\frac{\partial(\delta\psi)}{\partial\mathbf{n}}\right)^{+}\!(\mathbf{r}) - 2q_n\delta\psi^+(\mathbf{r}) - Q_n\right] = \\ = \varepsilon^- \left[\left(\frac{\partial(\delta\psi)}{\partial\mathbf{n}}\right)^{-}\!(\mathbf{r}) - 2q_n\delta\psi^-(\mathbf{r}) - Q_n\right], \end{aligned} \tag{1.13}$$

де $\varepsilon^+ = 1$, $\varepsilon^- = (1-\bar{u})^2$, $Q_n = \mathbf{Q}\cdot\mathbf{n_r}$, $q_n = \mathbf{q}\cdot\mathbf{n_r}$, а $\mathbf{n_r}$ позначає зовнішню нормаль в точці $\mathbf{r} \in S$. Зазначимо, що зовні включення $\psi^+(\mathbf{r}) \equiv n(\mathbf{r})$ і $\psi^+(r\to\infty) \to n_0$.

Розпочнемо з розгляду окремого випадку половинного заповнення ($n_0 = 1/2$), для якого вдається виписати розв'язок (1.12) в явному вигляді. В цьому випадку другий доданок в (1.12) зникає ($\mathbf{q} = 0$), а задача формально зводиться до стандартної електростатичної задачі про діелектричну частинку в постійному полі $\mathbf{Q} = \mathbf{g}/4$:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\boldsymbol{\nabla}\delta\psi^{\pm}(\mathbf{r}) - \mathbf{Q}\right] = 0. \tag{1.14}$$

Розподіл густини $\delta\psi(\mathbf{r})$ є аналогічним до розподілу електростатичного потенціалу, що характеризує розсіяне поле, і в двовимірному випадку має вигляд:

$$\psi^{\pm}(r,\vartheta) = \frac{1}{2} - \lambda\frac{|\mathbf{g}|}{4}\left(\frac{R}{r}\right)^{\pm 1}\cos\vartheta, \tag{1.15}$$

де функція

$$\lambda(\bar{u}) = \frac{1-(1-\bar{u})^2}{1+(1-\bar{u})^2} \tag{1.16}$$

враховує залежність амплітуди збурення від «прозорості» включення ($0 \leqslant \lambda \leqslant 1$), а ϑ — кут між векторами $\mathbf{g}$ та $\mathbf{r}$.

Як видно з (1.15), при рівноважній концентрації газу $n_0 = 1/2$ форма сліду відрізняється від звичної. Область підвищеної густини газу перед включенням і область розрідження позаду нього симетричні, а їх профіль має степеневу асимптотику: $\delta\psi(r,0) = -\delta\psi(r,\pi) \sim r^{-1}$. Даний результат узгоджується з чисельними результатами, отриманими для ґраткового газу в наближенні середнього поля (локальної рівноваги на вузлі), див. Рис. 1.2*б*, і пояснює як протяжний характер так і симетрію хвоста «вперед/назад» у випадку напівзаповненого середовища.

В загальному випадку, коли $n_0 \neq 1/2$, наближення лінійного дрейфового потоку, рівняння (1.12), дозволяє якісно описати концентраційне перемикання асимптотик, а також асиметрію збурення густини газу перед та за включенням, Рис. 1.2а та 1.2в. Рівняння (1.12) можна спростити, представивши розв'язок у вигляді

$$\delta\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r})e^{\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \tag{1.17}$$

де функція $\varphi(\mathbf{r})$ всередині та зовні включення задовольняє рівняння Гельмгольца

$$(\nabla^2 - q^2)\varphi^{\pm}(\mathbf{r}) = 0 \tag{1.18}$$

та умови зшивки на поверхні включення S:

$$\varphi^+ = \varphi^-, \qquad \varepsilon^+ \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \right)^+ (\mathbf{r}) - q_n \varphi^+(\mathbf{r}) \right] - \tag{1.19}$$

$$- \varepsilon^- \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \right)^- (\mathbf{r}) - q_n \varphi^-(\mathbf{r}) \right] = Q_n(\varepsilon^+ - \varepsilon^-) e^{-\mathbf{q}\mathbf{r}}.$$

Далі зручно перейти від рівнянь (1.18) та (1.19) до інтегрального рівняння, користуючись методом вторинних поверхневих джерел [86–88]. Для цього представимо розв'язок рівняння (1.18) у вигляді потенціалу простого шару:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int\limits_S G_0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \mu(\mathbf{r}') \mathrm{d}\mathbf{r}', \tag{1.20}$$

де $G_0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ — функція Гріна для (1.18), яка визначається екранованим кулонівським потенціалом

$$G_0 = \frac{e^{-q|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|}, \qquad \text{або} \qquad K_0(q|\mathbf{r}|) \tag{1.21}$$

у три- та двовимірному випадках, відповідно, а $\mu(\mathbf{r}')$ — це індукована густина на поверхні включення S, інтегральне рівняння для якої визначається умовами зшивки (1.19) і в компактному вигляді може бути записане як

$$(\lambda - 1)\mu(\mathbf{r}) + 2\lambda \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \right)^+ (\mathbf{r}) - q_n(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) \right] = 2\lambda Q_n(\mathbf{r}) e^{-\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \tag{1.22}$$

де $\mathbf{r} \in S$, $\varphi(\mathbf{r})$ визначається виразом (1.35), а λ — виразом (1.16). При виведенні (1.22) ми скористались теоремою про стрибок нормальної похідної потенціалу простого шару [86]:

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \right)^\pm (\mathbf{r}) = \mp \frac{1}{2} \mu(\mathbf{r}) + \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{r}). \tag{1.23}$$

Представлення розв'язку $\varphi(\mathbf{r})$ у вигляді (1.35) дозволяє робити якісні судження про асимптотичну поведінку розподілу $\psi(\mathbf{r})$ на віддалі від включення. Обмежившись розглядом двовимірного випадку та кругової форми включення з радіусом R, розподіл $\psi(\mathbf{r}) = n_0 + \delta\psi(\mathbf{r})$ з врахуванням (1.17) та (1.35) можна записати як

$$\psi(\mathbf{r}) = n_0 + \frac{1}{2\pi} e^{\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \int\limits_S K_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\mu(\mathbf{r}')\mathrm{d}\mathbf{r}'. \tag{1.24}$$

Тут $\frac{1}{2\pi} K_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ — модифікована функція Бесселя, яка є двовимірною функцією Гріна рівняння (1.18). В полярній системі координат, враховуючи симетрію задачі, поверхневу густину можна представити у вигляді розкладу

$$\mu(\vartheta) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \cos n\vartheta, \tag{1.25}$$

де ϑ — кут між $\mathbf{r}$ та напрямком зовнішнього поля $\mathbf{g}$, а C_n — константи розкладу.

Коефіцієнти C_n або $\alpha_n = I_n(z)C_n$ визначаються з інтегрального рівняння (1.22). В полярній системі координат, пов'язаній з центром включення, воно має вигляд

$$(\lambda - 1)\mu(\vartheta) + \frac{\lambda R}{\pi} \left[\frac{\partial}{\partial r}\bigg|_{r \to R+0} - q\beta\cos\vartheta \right] \int\limits_{-\pi}^{\pi} K_0(qr, qR, \vartheta - \vartheta')\mu(\vartheta')\mathrm{d}\vartheta' =$$
$$= 2\lambda|\mathbf{Q}|\cos\vartheta e^{-\beta qR\cos\vartheta}. \tag{1.26}$$

Розв'язок $\mu(\vartheta)$ рівняння (1.26) представимо у вигляді (1.25), а для ядра рівняння скористаємось теоремою додавання для функцій Бесселя [89], представивши його у вигляді:

$$K_0\left(\sqrt{(qR)^2 + (qr)^2 - 2Rrq^2\cos(\vartheta - \vartheta')}\right) =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (2 - \delta_{n,0}) I_n(qR) K_n(qr) \cos n(\vartheta - \vartheta') \tag{1.27}$$

при $r > R$ (з наступним взяттям ліміту $r \to R + 0$. В правій частині використовується розклад [89]:

$$e^{-\beta qR \cos\vartheta} = \sum_{n=0}^{\infty} (-\beta)^n \, (2 - \delta_{n,0}) I_n(qR) \cos n\vartheta. \tag{1.28}$$

Виховуючи матричні елементи, з рівняння (1.26) отримаємо систему лінійних рівнянь

$$\begin{aligned}(1 + \delta_{n,0}) \left[(\lambda - 1) I_n^{-1}(z) + 2\lambda z K_n'(z) \right] \alpha_n - \lambda\beta z [(1 + \delta_{n,0}) K_{n+1}(z) \alpha_{n+1} + \\ + (1 - \delta_{n,0} + \delta_{n,1}) K_{n-1}(z) \alpha_{n-1}] = 4|\mathbf{Q}|\lambda(-\beta)^{n-1} I_n'(z),\end{aligned} \tag{1.29}$$

де $z = qR$, $\alpha_n = I_n(z) C_n$, $I_n(z)$ и $K_n(z)$ — модифіковані функції Бесселя, а штрих позначає похідну за аргументом z. Параметр $\beta = (1/2 - n_0)/|1/2 - n_0|$ набуває значень $+1$ та -1 при рівноважних концентраціях $n_0 < 1/2$ та $n_0 > 1/2$, відповідно.

Використовуючи розклад (1.25) і теорему додавання для функцій Бесселя [89], розподіл концентрації (1.24) зовні включення, $\psi^+(\mathbf{r}) \equiv n(\mathbf{r})$, можна представити у вигляді

$$n(r, \vartheta) = n_0 + e^{\beta qr \cos\vartheta} R \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n K_n(qr) \cos n\vartheta. \tag{1.30}$$

На віддалі від включення, коли $qr \gg 1$, можна скористатись асимптотичним розкладом для функцій Бесселя [89]

$$K_n(qr) \simeq \sqrt{\frac{\pi}{2qr}} e^{-qr} \left(1 + \frac{4n^2 - 1}{8qr} + \cdots \right), \tag{1.31}$$

з врахуванням якого, вираз (1.30) набуде вигляду

$$n(r,\vartheta) \simeq n_0 + e^{-qr(1-\beta\cos\vartheta)}\sqrt{\frac{\pi}{2}}R\sum_{n=0}\alpha_n\left[(qr)^{-\frac{1}{2}} + \frac{4n^2-1}{8}(qr)^{-\frac{3}{2}} + \cdots\right]\cos n\vartheta. \tag{1.32}$$

З виразу (1.32) безпосередньо випливає, що за перемикання асимптотик при зміні рівноважної концентрації n_0 відповідає експоненційний множник. При значенні $n_0 < 1/2$ ($\beta = 1$), позаду включення ($\vartheta = 0$) показник експоненти занулюється і характерна поведінка визначається степеневою асимптотикою, в той час як перед включенням ($\vartheta = \pi$) поведінка буде експоненційною, тобто при низькій рівноважній концентрації газу форма профілю відповідає стандартній. Якщо ж $n_0 > 1/2$ ($\beta = -1$), профіль збурення буде характеризуватись експоненційно коротким «хвостом» позаду включення і протяжним «хвостом вперед» перед включенням з характерною степеневою асимптотикою. Таким чином, інверсія хвоста «вперед/назад», яка була проілюстрована чисельно, Рис. 1.2, супроводжується «перемиканням» асимптотичних режимів: при збільшенні рівноважної густини середовища характерна асимптотична поведінка профілю позаду включення перемикається неперервним чином зі степеневої на експоненційну, а перед включенням — у зворотному порядку. Амплітуда профілю збурення в (1.32) задовольняє очевидним вимогам $n(r,\vartheta=0) < n_0$ та $n(r,\vartheta=\pi) > n_0$, що відображає наявність розрідженої області за включенням і відносно більш щільної перед ним, у відповідності до напрямку поля. За зміну знаку другого доданку в (1.32) відповідає множник $\cos n\vartheta$.

У тривимірному випадку, розподіл $n(\mathbf{r}) = n_0 + \delta n(\mathbf{r})$ для одинокого включення можна представити у вигляді

$$n(\mathbf{r}) = n_0 + e^{\mathbf{qr}}\int\limits_S \frac{e^{-q|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\mu(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}\mathbf{r}'. \tag{1.33}$$

На далеких відстанях від включення, коли $|\mathbf{r}| \gg R$, можна легко виділити головну асимптотику збурення густини газу δn, індукованого зовнішнім полем $\mathbf{q} = (1/2 - n_0)\mathbf{g}$:

$$\delta n(\mathbf{r}) \approx \frac{e^{\mathbf{qr}-q|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|}\tilde{I}(\mathbf{r}, \mu), \tag{1.34}$$

$\tilde{I}(\mathbf{r}, \mu)$ відповідає за залежність знаку δn від напрямку $\mathbf{r}$ та містить степеневу залежність від $|\mathbf{r}|$.

Таким чином, адаптуючи метод вторинних поверхневих джерел до даної задачі, тобто використовуючи представлення виду

$$\delta n(\mathbf{r}) = \int\limits_S G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mu(\mathbf{r}')\mathrm{d}\mathbf{r}', \tag{1.35}$$

де

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^{-q|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|+\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tag{1.36}$$

у тривимірному випадку та

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi}e^{\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}K_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \tag{1.37}$$

у двовимірному, вдається врахувати наступні важливі моменти:

- функція Ґріна G є несиметричним, екранованим, кулонівським потенціалом, що дозволяє правильно описати несиметричну форму збурення (слід);
- це також дозволяє аналітично пояснити інверсію сліду, при збільшенні рівноважної концентрації n_0;
- метод потенціалу простого шару (метод вторинних джерел на поверхні включення) дозволяє ввести поняття *поляризації* включення, тобто індукованого «заряду» на його поверхні, сумарна величина якого є відмінною від нуля.

Дійсно, можна отримати простий аналітичний вираз для збурення густини на великих відстанях від малої домішки, використовуючи якісний підхід, описаний в Додатку А. Збурення від точкового включення

$$\delta n(\mathbf{r}) \sim \left(\overline{\mathbf{\Omega}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}\right) G(\mathbf{r}) \tag{1.38}$$

має дипольний характер з несиметричним «потенціалом»

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi}\frac{e^{-q|\mathbf{r}|+\mathbf{qr}}}{|\mathbf{r}|}, \quad \text{або} \quad G(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi}e^{\mathbf{qr}}K_0(q|\mathbf{r}|) \tag{1.39}$$

у три- та двовимірному випадках, відповідно, а $\overline{\mathbf{\Omega}}$ формально відіграє роль індукованого (потоком) *дипольного моменту* частинки з тією особливістю, що повний індукований «заряд» є відмінним від нуля. Сам $\overline{\mathbf{\Omega}}$, в нашому випадку, асоційований не зі звичайним кулонівським потенціалом, а з несиметричною функцією Ґріна (1.39) — «несиметричним екранованим кулонівським потенціалом». Назва «потенціал» стосовно (1.39) є не зовсім коректною в силу його несиметричності, але ми будемо використовувати цей термін в загальному розумінні теорії потенціалу простого шару. Також слід зауважити, що анізотропний потенціал взаємодії вводився формально для опису неньютонівського характеру сил при наявності потоку в запорошеній плазмі, див. наприклад [90], в той час як в нашому випадку такий потенціал послідовно отримано.

Для того щоб показати наскільки добре працює лінійне наближення, порівняємо аналітичні асимптотики з результатом чисельних розрахунків для середніх чисел заповнення на вузлах з урахуванням нелінійності. Обмежимось простим граничним випадком $\lambda \to 1$ (що відповідає майже непроникному включенню з $u_0 \to 1$) та двома членами розкладу (1.25), $\rho(\vartheta) \approx C_0 + C_1 \cos\vartheta$. В цьому випадку система (1.29) суттєво спрощується і вирахування коефіцієнтів α_0 та α_1 теж. В цих наближеннях профіль перед

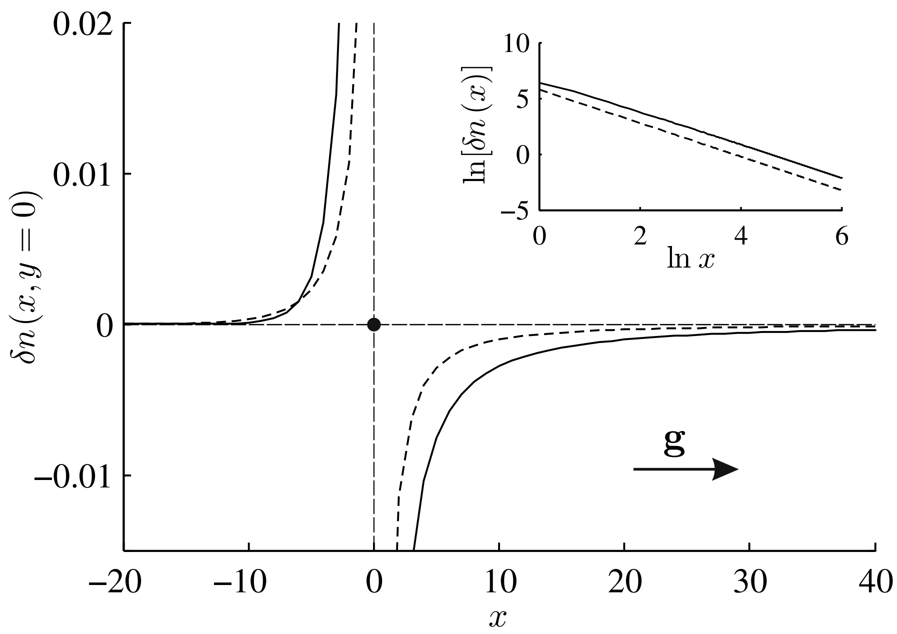


Рис. 1.3. Поведінка профілю $\delta n(x; y = 0)$. Суцільна лінія відповідає чисельному розв'язку (наближення середнього поля), а штрихова́ — асимптотичному розв'язку (довгохвильове наближення) при $n_0 = 0.1$, $|\mathbf{g}| = 0.5$ та $R = 0.5$; нахил прямих на внутрішньому графіку відповідає показнику асимптотики $-3/2$ при $x \gg 1$.

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

$$n(r, \vartheta = 0) \simeq n_0 - A\left\{K_1(z)I_2(z)(qr)^{-\frac{1}{2}} + \left[\frac{1}{2z} + \frac{3}{8}K_1(z)I_2(z)\right](qr)^{-\frac{3}{2}}\right\}, \tag{1.40}$$

$$n(r, \vartheta = \pi) \simeq n_0 + Ae^{-2qr}\left\{\left[\frac{2}{z} + K_1(z)I_2(z)\right](qr)^{-\frac{1}{2}} + \right.$$
$$\left. + \left[\frac{1}{4z} + \frac{3}{8}K_1(z)I_2(z)\right](qr)^{-\frac{3}{2}}\right\}, \qquad A = \frac{\sqrt{2\pi}n_0(1-n_0)|\mathbf{g}|R}{zK_1(z)K_2(z)}. \tag{1.41}$$

З (1.40) та (1.41) безпосередньо випливає, що зміна знаку амплітуди збурення густини δn відповідає напрямку зовнішньої сили, тобто область збіднення виникає позаду включення, див. Рис. 1.3. В граничному випадку малого радіусу включення, $z \ll 1$, асимптотика збідненої області позаду нього (сліду) поводить себе як[2] $\sim -\sqrt{\pi}n_0(1-n_0)|\mathbf{g}|qR^2(2qr)^{-3/2}$ і непогано узгоджується з чисельними результатами для домішки з характерним розміром порядку сталої ґратки ℓ (див. Рис. 1.3). Зазначимо, що ці асимптотики мають сенс лише на великих відстанях від домішки. Водночас, близько до поверхні домішки домінують нелінійні ефекти і лінійне наближення вже погано узгоджується поблизу навіть малої частинки, див. Рис. 1.3. Ці нелінійні ефекти, типу ефекту блокади, будуть розглянуті в наступному пункті на основі чисельних розрахунків для середніх чисел заповнення вузлів ґратки.

1.4 Нелінійний ефект блокади поблизу поверхні великого включення

Тут буде коротко обговорено нелінійні ефекти, зумовлені блокадою частинок газу, на основі числових стаціонарних розв'язків двовимірного рівняння (1.2) (наближення локальної рівноваги). Для відносно великого включення з розміром значно більшим сталої ґратки, екранування потоку газу поблизу поверхні включення призводить до росту його ефективної поверхні. Як результат, перед включенням формується компактна щільна область, Рис. 1.4*а*, 1.4*б*, та 1.4*в*. На Рис. 1.4*а* показано, що поведінка δn поблизу поверхні включення має вигляд сходинки при $n_0 < 1/2$. Така поведінка збурення густини δn є досить очікуваною, оскільки загальний тип рівняння (3.1) допускає розв'язки типу доменної стінки (кінка), наприклад, для однокомпонентного ґраткового газу, $u \equiv 0$. При наближенні концентрації газу n_0 до значення $1/2$, компактна щільна область росте (одночасно, її границя дещо розмивається), див. Рис. 1.4*в*, доти поки не сформується однорідно загасаючий розподіл. Далі, при $n_0 > 1/2$, перед включенням

[2]Зауважимо, що отримана нами асимптотика, $\sim r^{-3/2}$, також співпадає з асимптотикою загасання сліду далеко позаду домішки яка рухається в ґратковому газі, що була представлена в роботі [19]. Однак, в останньому випадку концентраційного перемикання сліду не спостерігається [19, 24].

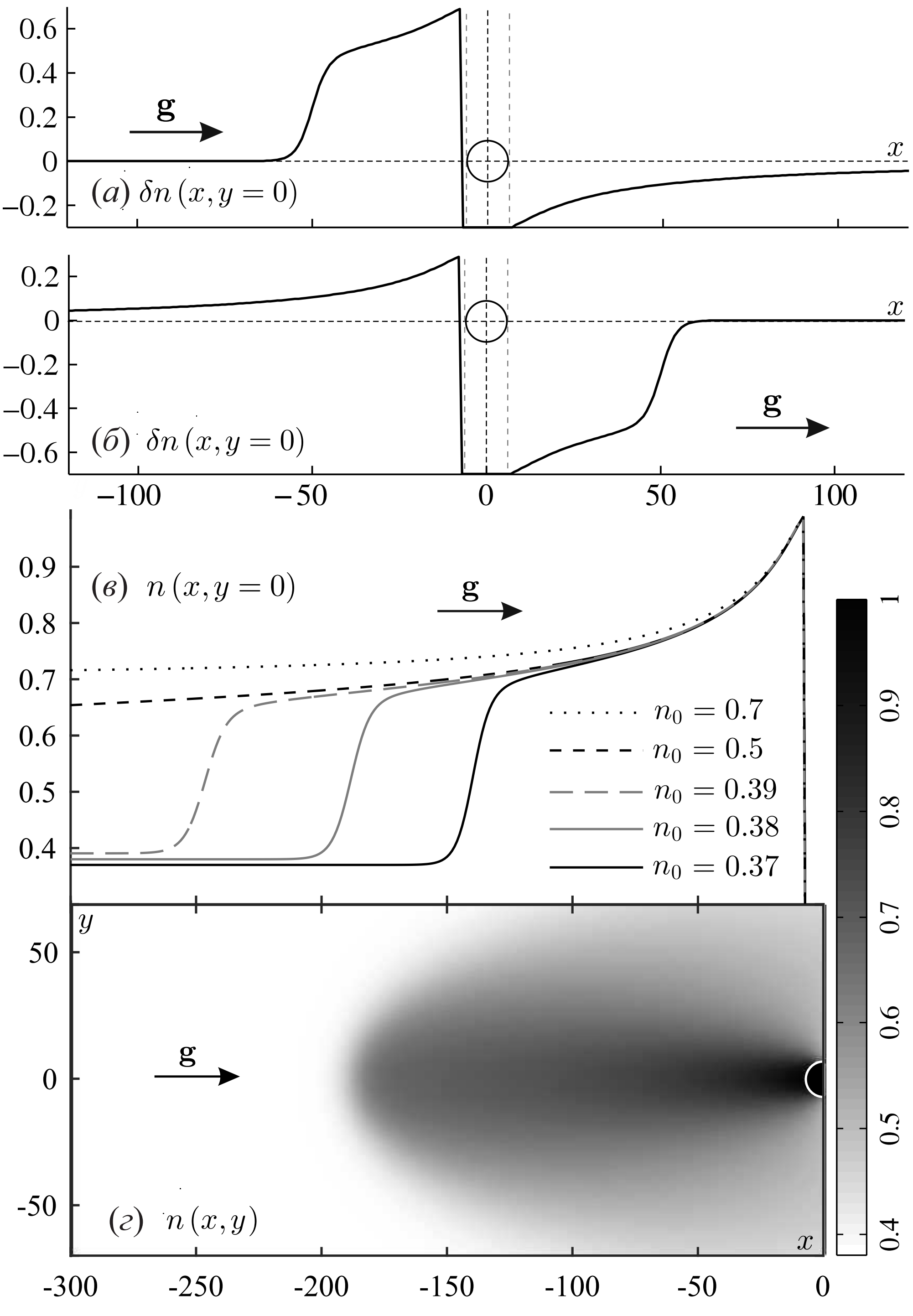


Рис. 1.4. Стаціонарні сліди (чисельний розрахунок) з кінковими профілями $\delta n(x, y = 0)$, які описують каверни *а*) перед та *б*) позаду включення; $n_0 = 0.3$ для *а*) та $n_0 = 0.7$ для *б*). *в*) Профілі концентрації $n(x, y = 0; n_0)$ для декількох значень n_0: область блокади перед включенням росте, коли n_0 прямує до $1/2$; коли ж значення n_0 перевищує половинне заповнення, профіль сліду стає інвертованим. *г*) Розподіл концентрації $\delta n(x, y) = n(x, y) - n_0$ при $n_0 = 0.38$. Тут, $|\mathbf{g}| = 0.5$, $\bar{u} = 1$, $a = 7$ (в одиницях ℓ), і просторові координати також приведені в одиницях ℓ.

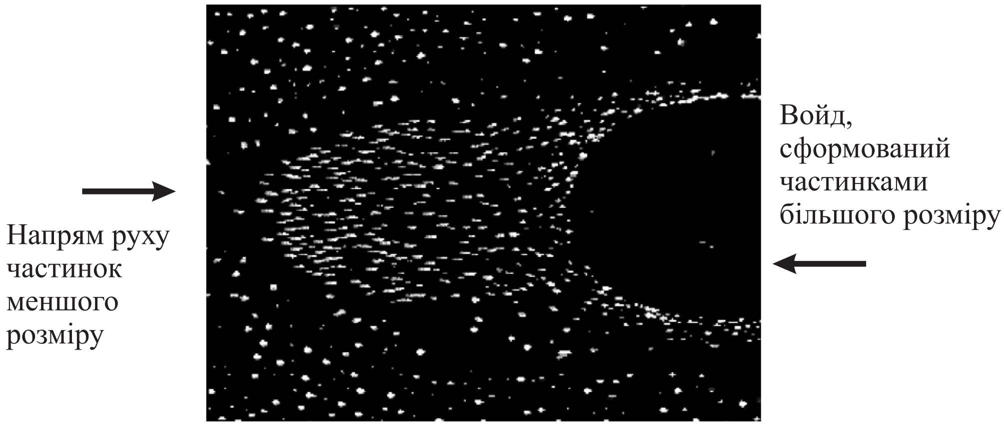


Рис. 1.5. *Адаптовано з роботи* [55]. Спостереження формування компактних структур в запорошеній плазмі в умовах мікро-гравітації [53, 55] при інжекції пилинок меншого розміру в напрямку області розташування войду, вже сформованого пилинками більшого розміру. Формування компактної щільної структури поблизу межі войду показано на стадії майже стаціонарного режиму [54], пор. з Рис. 1.4*г*.

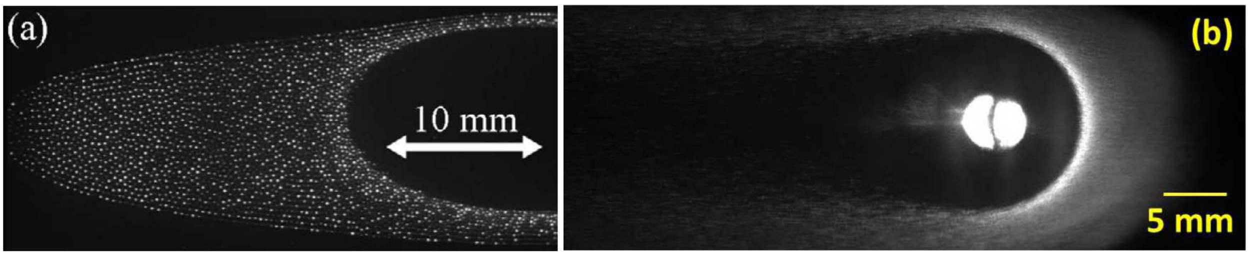


Рис. 1.6. *Адаптовано з робіт* (a) [91] та (b) [92]. (a) Спостереження формування компактних структур в запорошеній плазмі в умовах мікрогравітації. (b) Формування компактної щільної структури поблизу включення в потоці частинок запорошеної плазми.

профіль трансформується в інвертований дифузійний слід у вигляді протяжної щільної області, Рис. 1.4*в*, в той час як позаду включення формується локалізована збіднена область (типу каверни) з інвертованим кінковим профілем, Рис. 1.4*б*.

Зазначимо, що аналогічні компактні структури виникають в запорошеній плазмі [53–55]. Вони формуються потоком менших порошинок перед *войдом*, сформованим великими порошинами, Рис. 1.5(див. також Рис. 1.6*a* та *b*). Крім того, ця щільна область може набувати впорядкованої структури типу кристалу, що обумовлено міжчастинковою взаємодією пилинок

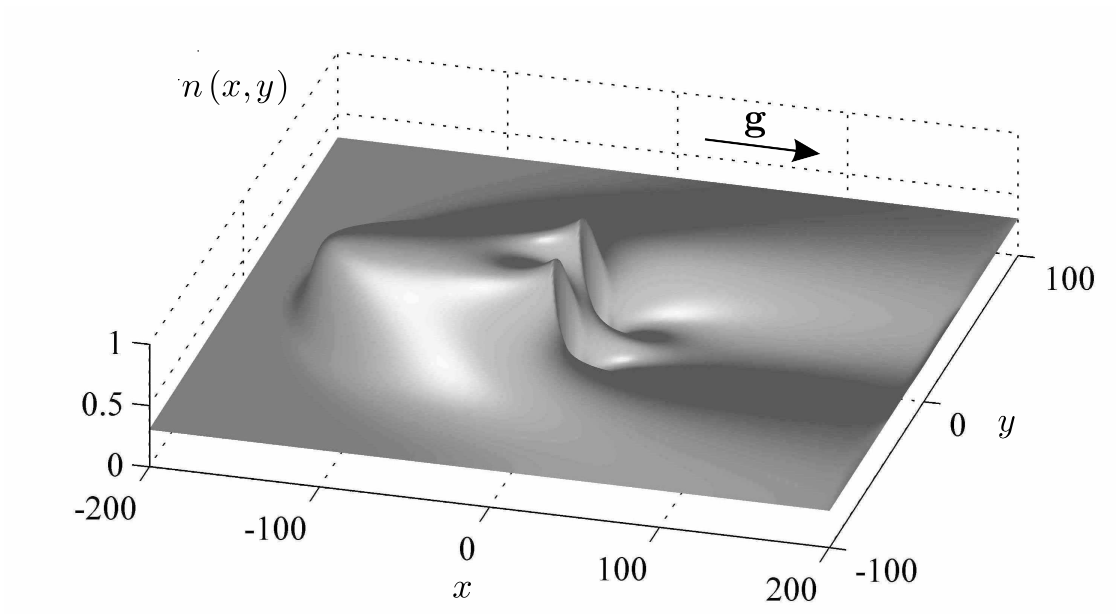


Рис. 1.7. Кінковий концентраційний профіль $n(x_i, y_i)$, що сформувався перед двома близько розташованими включеннями при $n_0 = 0.3$. Відстань між центрами включень становить 4ℓ, решта параметрів системи — такі ж як на Рис. 1.4.

через потенціал Юкави [53, 55]. В нашій моделі розглядалось мінімальне міжчастинкове відштовхування типу жорстких корів, що не дає можливості отримати подібні впорядковані структури, проте їх формування є очікуваним, якщо врахувати взаємодію принаймні на сусідніх вузлах, оскільки в рівноважному випадку (принаймні в двовимірному) такі структури типу рідини чи кристалу є відомими, наприклад, впорядкований c(2×2) стан частинок ґраткового газу з сильним відштовхуванням між найближчими сусідами [93]. Також, отримані в цьому пункті структури з характерною різкою границею (кінк) якісно узгоджуються с формуванням страт в плазмі [56, 57] та запорошеній плазмі [55]. Зауважимо, що для запорошеної плазми характерні ефекти прояву обмеженої стисності (finite compressibility) потоку, див. [10], яка врахована в нашій моделі ґраткового газу за рахунок обмеження виключеного об'єму.

Додамо, що подібний нелінійний ефект (формування компактної області з різкою границею, «страт») виникає також для близько розташованих включень, коли їхні індивідуальні «шуби» збурення густини перекриваються. Перекриття призводить до додаткового екранування потоку газу і до формування спільної нелінійної «шуби» збурення навколо них з кінковим профілем збурення густини, Рис. 1.7, принаймні у двовимірному випадку. Зазначимо, що формування спільної «шуби» може свідчити про ефективне спарювання між включеннями (при $n_0 > 1/2$), тобто формування стабільного зв'язаного дублету [45].

1.5 Висновки

Використовуючи модель ґраткового газу, в даному розділі показано, що за наявності короткосяжних міжчастинкових кореляцій в газі дифузійний слід (збурення густини), породжений рухомим включенням, і слід, що виникає при обтіканні нерухомого включення потоком газу, можуть принципово відрізнятися.

В першому випадку, коли включення або трейсер рухається в газі під дією зовнішнього рушійного поля, слід має звичну, типову структуру (див. [11, 29, 45]): локалізована область підвищеної густини газу перед включенням та протяжний збіднений частинками хвіст позаду нього. Така структура сліду слабо залежить від рівноважної концентрації газу [19, 24] і збурення середовища, що характеризує довготривалу пам'ять про проходження включення, направлене назад, у вигляді хвоста збіднення.

В другому випадку, коли «важке» включення знаходиться в потоці газу (зумовленому зовнішнім рушійним полем), в системі спостерігається концентраційне перемикання. За низьких рівноважних концентрацій газу ($n_0 < 0.5$) слід має звичну структуру, з протяжним хвостом збіднення позаду включення. За високих концентрацій ($n_0 > 0.5$) відбувається інверсія сліду, який тепер характеризується протяжною областю підвищеної густини газу перед включенням і локалізованою областю збіднення позаду нього. Іншими словами, основне збурення середовища направлене вперед. Таке перемикання зумовлене ефектом блокади потоку частинок газу, що пов'язаний з короткосяжним відштовхуванням (на одному вузлі) між частинками.

Перемикання сліду, отримане чисельно для ґраткового газу в наближенні середнього поля (пункт 1.2) характеризується перемиканням режимів асимптотичної поведінки профілю далеко від включення. Останнє було продемонстровано, використовуючи довгохвильове наближення (1.10) та наближення лінійного потоку (1.12). Дані наближення дозволяють якісно описати перемикання як неперервний перехід від степеневого характеру загасання збурення густини газу, що характеризує протяжну частину сліду, до експоненційного, що характеризує локалізовану область, «скорочення» сліду при зміні концентрації. Крім цього, метод потенціалу простого шару, або метод вторинних джерел на поверхні включення, дозволяє ввести поняття «поляризації» включення, повний індукований «заряд» якого не зберігається.

Лінійне наближення добре описує асимптотичну поведінку сліду у випадку малих розмірів включення і непогано узгоджується з чисельними розрахунками, Рис. 1.3, а також співпадає з результатами, отриманими для асимптотики сліду, створюваного трейсером, що рухається в ґратковому газі [19]. У випадку великого розміру включення, лінійне наближення дає лише якісне узгодження і є незастосовним поблизу самого включення. Останнє пов'язано з посиленням режиму блокади частинок газу і домінуванням нелінійного доданку в рівнянні (1.10).

Основні результати розділу опубліковані в праці [68].

РОЗДІЛ 2
ІНДУКОВАНА ДИСИПАТИВНА ВЗАЄМОДІЯ

2.1 Вступ

В цьому розділі ми розглянемо поведінку дисипативної взаємодії між включеннями індуковану їх слідами (*wake-mediated interaction*) в нелінійному середовищі — в броунівському газі з короткосяжним міжчастинковим відштовхуванням. В цьому випадку, дисипативну взаємодію між включеннями також часто називають нерівноважною взаємодією збіднення (*non-equilibrium depletion interaction*) або ентропійною взаємодією [25, 28, 29]).

В рівновазі, сили збіднення мають короткосяжний характер: характерний масштаб сил відповідає характерному радіусу взаємодії між частинками середовища [30, 31]. Ці сили виникають між близько розташованими включеннями (в нашому випадку, на віддалі порядку сталої ґратки), коли концентрація частинок газу між включеннями стає меншою ніж навколо них, внаслідок скінченного радіусу взаємодії для частинок газу. Як результат, тиск частинок середовища на поверхні включень зовні буде сильнішим ніж в області між включеннями, звідки частинки газу витісняються (напр., неоднорідний осмотичний тиск колоїдної суспензії на пару включень, див. [94]). Зауважимо, що рівноважні сили збіднення визначаються тим же корелятором, що і флуктуаційно індуковані (казимироподібні) сили [84, 85], і пов'язані з формфактором газу, який визначає ближній порядок.

У протилежність, нерівноважні сили між домішками можуть демонструвати далекосяжну поведінку, обумовлену тривалими дифузійними слідами породженими рухом домішок [25, 27]. Крім того, як ми бачили в попередньому розділі, в нерівноважному випадку може виникати екранування потоку газу між включеннями — запирання потоку (*clogging*) зумовлене ефектом блокади, що може призводити до суттєвого підсилення ефективної взаємодії між ними, порівняно з рівноважним випадком.

Слід відзначити, що така ефективна взаємодія часто має незвичні властивості, наприклад, вона може порушувати третій закон Ньютона [9, 25, 28, 38]. Неньютонівський характер нерівноважних сил збіднення було показано для випадку низьких концентрацій газу [25], коли міжчастинковою взаємодією можна знехтувати.

В загальному, індукована дисипативна взаємодія визначається, головним чином, структурою слідів домішок і повинна бути чутливою до змін форми слідів, зокрема, до формування спільного сліду пари домішок та до нелінійних ефектів в газі, таких як ефект блокади — локальне екранування потоку газу. Збільшення концентрації газу призводить до посилення ролі взаємодії між частинками газу. Як було показано в попередньому розділі, це призводить до істотних змін форми сліду від домішки в потоці — інверсії сліду.

Далі ми проаналізуємо 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. Ми покажемо що для далеко рознесених малих домішок, коли нелінійні ефекти менш суттєві, дисипативні сили між ними відносяться до типу індукованої диполь-дипольної (в загальному випадку, мультипольної) взаємодії, що асоційована з анізотропним несиметричним кулонівським потенціалом. На відміну від звичайної диполь-дипольної взаємодії, дана описує взаємодію між індукованими несиметричними «дипольними моментами» домішок, тобто між «диполями» з відмінним від нуля повним індукованим «зарядом». Ми також покажемо, 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. На основі залежностей дисипативних сил від рівноважної концентрації буде показано ефект перемикання (зміни знаку) ефективної взаємодії, зумовлений інверсією сліду, розглянутою в попередньому розділі.

Слід зазначити, що в рамках використовуваної моделі існує проблема введення сили, це питання буде обговорено в наступному пункті.

2.2 Зауваження щодо введення сили в нерівноважному стаціонарному стані

Спочатку розглянемо точкове включення (домішку) — нерухому частинку, що заселяє вузол ґратки $\mathbf{R}_j$ і має заданий потенціал взаємодії $U(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$ з частинками ґраткового газу на вузлах $\mathbf{r}_i$. Тоді гамільтоніан ґраткового газу при наявності домішок (Лоренців газ) запишеться як $H = H_0 + H_{\text{int}}$, де H_0 — гамільтоніан вільного ґраткового газу (без домішок), а $H_{\text{int}} = \sum_{ij} n_i U(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$ описує взаємодію між частинками газу та домішками, $n_i = 0, 1$ — числа заповнення вузла $\mathbf{r}_i$.

В рівновазі, повна сила, що діє на j-у домішку може бути записана як (див. [28])

$$\boldsymbol{f}_j^{eq} = \left\langle -\frac{\delta}{\delta \mathbf{R}_j} H_{int} \right\rangle = \sum_{\{n\}} \left(-\frac{\delta}{\delta \mathbf{R}_j} H_{int} \right) \rho(\{n\}) \tag{2.1}$$

$$= \sum_i \langle n_i \rangle \frac{\delta}{\delta \mathbf{r}_i} U(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j), \tag{2.2}$$

де $\rho(\{n\})$ — рівноважна функція розподілу (або статистичний оператор в матричному представленні [64]) реалізації заданої конфігурації $\{n\}$ чисел заповнення

$$\rho(\{n\}, 0) = Z^{-1} \exp(-H\{n\}/kT). \tag{2.3}$$

$Z = \sum_{\{n\}} \exp(-H\{n\}/kT)$, $\langle n_i \rangle$ — середні числа заповнення вузлів $\mathbf{r}_i$, які описують рівноважний розподіл частинок газу.

Силу $\boldsymbol{f}_j^{eq}$, вирази (2.1) або (2.2), можна виразити в термінах вільної енергії $F = -kT \ln Z$ як

$$\boldsymbol{f}_j^{eq} = -\frac{\delta}{\delta \mathbf{R}_j} F. \tag{2.4}$$

Дане співвідношення часто використовується для означення *рівноважних сил збіднення* (*depletion force*) [32, 33].

В нерівноважному випадку, існують різні підходи до введення дисипативної сили або взаємодії між включеннями (домішками) через середовище, представлене броунівським газом. Взагалі кажучи, ці підходи не еквівалентні один одному і можуть давати різні результати, див. [28].

В даній роботі, будемо використовувати підхід, що базується на виразі (2.1) з нерівноважним статистичним оператором $\rho_t(\{n\})$ (див. [28])

$$\boldsymbol{f}_j^{neq} = \sum_{\{n\}} \left(-\frac{\delta H_{\text{int}}}{\delta \mathbf{R}_j} \right) \rho_t(\{n\}) = \sum_i \langle n_i \rangle_t \frac{\delta}{\delta \mathbf{r}_i} U(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j), \tag{2.5}$$

де $\rho_t(\{n\})$ задовольняє основне рівняння для стрибкового процесу, див. [42], а $\langle n_i \rangle_t = \sum_{\{n\}} n_i \rho_t(\{n\})$ — концентрація нерівноважного газу. Також існує інший підхід, який полягає в узагальненні (2.4) на нерівноважний випадок шляхом введення ефективного нерівноважного потенціалу або нерівноважної вільної енергії газу [28, 42, 50, 95, 96]. Як було показано в роботі [28], ці два означення нерівноважної сили не є еквівалентними. Представлення (2.5) для сили, яка діє на включення з боку частинок газу, є подібним до гідродинамічного означення сили, яке використовувалось, зокрема, в роботі [25] для опису нерівноважних сил збіднення між включеннями в газі без міжчастинкової взаємодії. Далі, будемо використовувати представлення (2.5) для опису нерівноважних сил збіднення, що діють між включеннями і опосередковані збуреннями газу.

В континуальній границі і в наближенні середнього поля, $\boldsymbol{f}_j^{neq}$ набуває вигляду

$$\boldsymbol{f}_j^{neq} = -\int U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)\nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t)\, \mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{2.6}$$

де $n(\mathbf{r}, t) = \langle n(\mathbf{r})\rangle_t$.

Якщо включення є кластером, сформованим частинками іншої (важкої) компоненти, потенціал $U(\mathbf{r})$ описує розподіл концентрації цієї компоненти і $n(\mathbf{r}, t)$ задовольняє рівняння (1.3), отримане в довгохвильовому наближенні.

В подальшому, щоб виділити внесок збурення $\delta n(\mathbf{r}, t)$, індукованого потоком газу (або зовнішнім полем $\mathbf{g}$), з повної сили (2.6), ми розглянемо величину

$$\boldsymbol{f}_j = -\int U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)\nabla_{\mathbf{r}} \delta n(\mathbf{r}, t)\, \mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{2.7}$$

де $\delta n(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) - n_0(\mathbf{r})$, а $n_0(\mathbf{r})$ — рівноважна (середня в системі) концентрація газу.

У випадку включення з різкою межею, $\boldsymbol{f}_j$ набуває звичного вигляду

$$\boldsymbol{f}_j = -\int\limits_{S_j} \mathbf{n}(\mathbf{r})\delta n(\mathbf{r})\, \mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{2.8}$$

де S_j — це поверхня j-го включення, а $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ — зовнішня нормаль до неї в точці $\mathbf{r}$.

Далі, нас будуть цікавити сили в нерівноважному стаціонарному стані, тобто в границі $t \to \infty$. В наступних розділах буде використовуватись лінеаризоване рівняння (1.3), з метою описати асимптотичну поведінку нерівноважних сил збіднення та ефект перемикання взаємодії для віддалених включень.

2.3 Зміна знаку дисипативної взаємодії при інверсії сліду

Покажемо, що перемикання знаку дисипативної взаємодії між включеннями при зростанні концентрації газу n_0 є прямим наслідком симетрії рівняння (1.3). Щоб продемонструвати цю властивість, розглянемо конкретний випадок двох включень, розташованих перпендикулярно до потоку газу, див. Рис. 2.1.

Для простоти, два включення з центрами в точках $\mathbf{R}_1 = (0, y_0)$ і $\mathbf{R}_2 = (0, -y_0)$ представлені гладкими розподілами з компактним носієм $u_j(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$. В цьому випадку сила, яку чинить збурення газу $\delta n(\mathbf{r})$ на j-те включення, записується як $\boldsymbol{f}_j = \int \delta n \nabla u_j \mathrm{d}\mathbf{r}$. Щоб показати можливість зміни знаку сили, достатньо розглядати лише y-компоненту сили $f_j^y(n_0)$, що діє на включення при концентрації газу n_0. Враховуючи співвідношення (1.7), можна отримати

$$f_j^y(n_0) = \int \delta n(\mathbf{r}; n_0) \partial_y u_j(\mathbf{r}) \, \mathrm{d}\mathbf{r} = -f_j^y(1 - n_0). \tag{2.9}$$

В окремому випадку напівзаповненого середовища ($n_0 = 1/2$) маємо $f_j^y(1/2) = -f_j^y(1/2) \equiv 0$, тобто ефективна взаємодія між включеннями зникає.

2.4 Індукована дисипативна взаємодія між двома середньовіддаленими великими включеннями

В цьому пункті ми розглянемо як взаємодія між частинками газу і нелінійне екранування потоку впливає на поведінку дисипативних сил, які діють між включеннями. Для відносно великих включень і достатньо великої концентрації n_0, потік газу генерує щільну область перед включенням, так як частинки газу не встигають залишати цю зону за рахунок латеральної дифузії. Така сильне нагромадження частинок газу локально посилює роль їх взаємодії, тому щільна область перед включенням повинна рости. Аналогічна поведінки виникає для близько розташованих включень, коли їх індивідуальні «шуби» збурення густини перекриваються, що призводить до формування спільної «шуби» навколо них та до додаткового екранування потоку газу. Останнє означає, що властивості дисипативної взаємодії між близько розташованими включеннями визначаються нелінійним ефектом блокади, за яких відповідає доданок $\sim n^2$ в рівнянні (3.1). Ці нелінійні ефекти будуть розглянуті чисельно на основі рівняння (1.2), нехтуючи флуктуаціями в газі.

Далі, на основі числових розрахунків, розглянемо індуковані дисипативні сили між двома включеннями для двох випадків їх взаємного розташування — вздовж потоку газу і перпендикулярно до нього. Будемо використовувати рівняння (1.2) (наближення локальної рівноваги на вузлі), яке враховує нелінійний ефект блокади для частинок газу. 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, ми розглянемо величину [25]

$$\boldsymbol{f}_{ij} = \boldsymbol{f}_i - \boldsymbol{f}_i^0 = \int \left[\delta n(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) - \delta n(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i)\right] \nabla u_i(\mathbf{r})\, \mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{2.10}$$

де $\boldsymbol{f}_i$ — повна сила, що діє на i-те включення при наявності j-го, $\boldsymbol{f}_i^0$ — індивідуальна сила тертя.

Випадок перпендикулярного розташування пари включень. На Рис. 2.1 приведено розподіли концентрації газу, які ілюструють інверсію колективного сліду: перехід від типової структури сліду (a) при $n_0 < 0.5$ (компактна щільна область перед включеннями і довгий хвіст, збіднений частинками газу, позаду) до нестандартної структури ($в$) при $n_0 > 0.5$ (протяжна щільна область перед включенням та локалізована збіднена область позаду).

В попередньому розділі було показано, що із симетрії *вакансія-частинка* випливає, що дисипативні сили, які діють між включеннями, мають бути парними функціями від $1/2 - n_0$, тобто $f^y_{12}(n_0) = -f^y_{21}(1 - n_0)$. Це означає, що при збільшенні концентрації газу інверсія сліду повинна спричинити перемикання ефективної дисипативної взаємодії з ефективно-

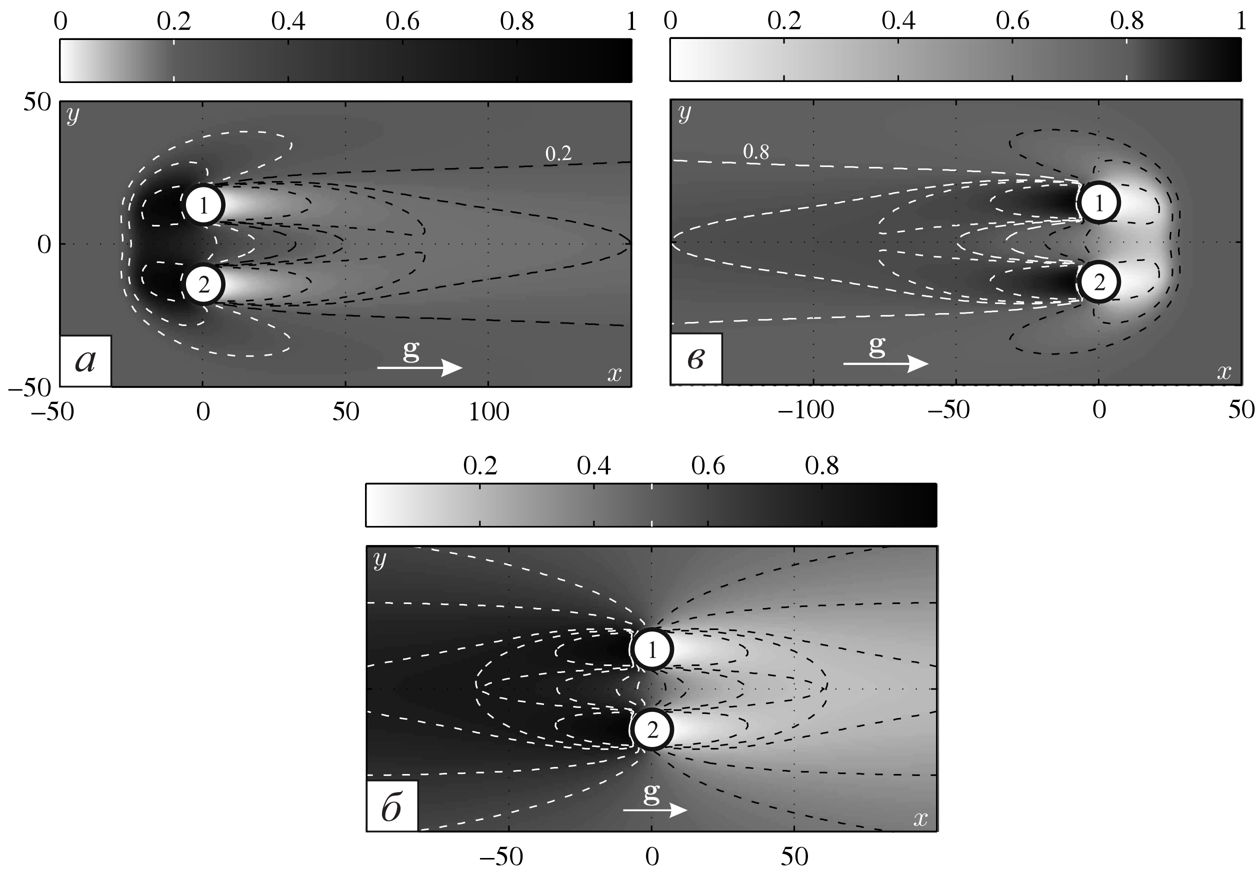


Рис. 2.1. *Поперечна орієнтація включень.* Стаціонарний розподіл концентрації (середніх чисел заповнення) частинок газу $\langle n(x_i, y_i)\rangle$ навколо включень, отриманий методом числового розрахунку для середніх чисел заповнення (1.2), двовимірний випадок. Приведені розподіли відповідають таким значенням рівноважної концентрації газу: $n_0 = 0.2$ (*а*), 0.5 (*б*), and 0.8 (*в*). Дані розподіли ілюструють три різні режими дисипативної взаємодії: *а* — ефективне відштовхування ($f^y_{12} > 0$, $f^y_{21} < 0$, $|f^y_{21}| = |f^y_{12}|$), *б* — взаємодія відсутня ($f^y_{21} = f^y_{12} = 0$), *в* — ефективне притягання ($f^y_{21} > f^y_{12}$). Зовнішнє поле $\mathbf{g}$ ($|\mathbf{g}| = 0.5$) направлене вздовж OX; непроникні ($\bar{u} = 1$) круглі включення мають радіус $a = 7$ (в одиницях ℓ); відстань між центрами включень дорівнює $4a$. Сірий колір тла на поданих розподілах відповідає рівноважній концентрації газу n_0, згідно колірної смуги над кожним рисунком. Просторові координати наведені в одиницях ℓ.

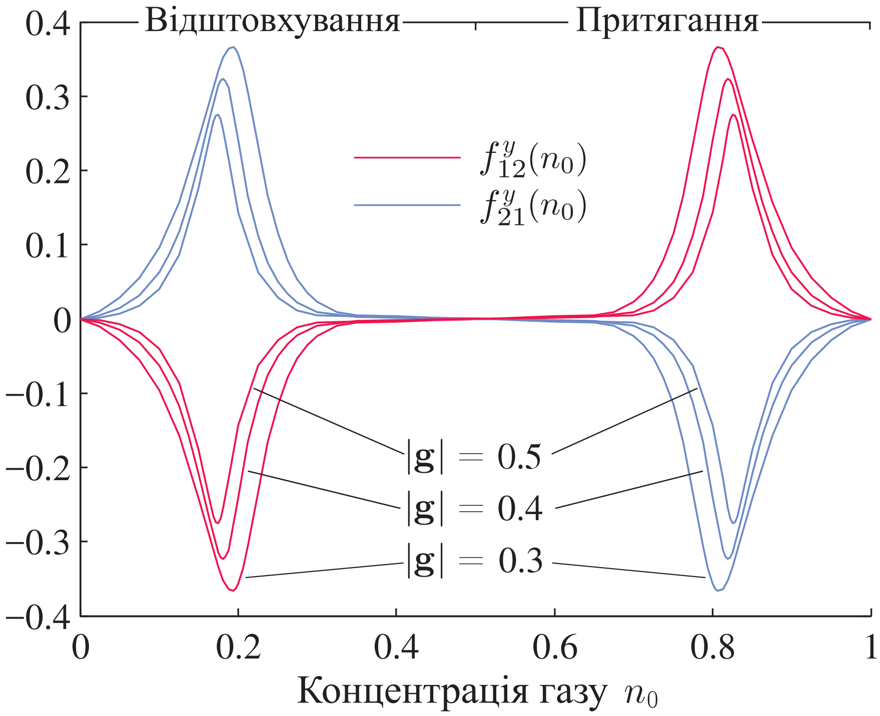


Рис. 2.2. *Перпендикулярне розташування.* Залежності y-компонент дисипативних сил $\boldsymbol{f}_{12}$ та $\boldsymbol{f}_{21}$ від рівноважної концентрації газу n_0. Для порівняння, приведено декілька залежностей для різних значень зовнішнього рушійного поля $|\mathbf{g}| = 0.3; 0.4; 0.5$. Решта параметрів системи такі ж як наведені в підписі до Рис. 2.1, сили приведені в одиницях kT/ℓ (ℓ — стала ґратки).

го відштовхування на притягання (або навпаки), Рис. 2.1. Така властивість дійсно підтверджується чисельними розрахунками, Рис. 2.2. Крім того, дисипативні сили між включеннями демонструють немонотонну залежність від n_0 з двома виразними піками, при $n_0 < 1/2$ та $n_0 > 1/2$. Ці пікові підсилення дисипативної взаємодії пов'язані з формуванням спільного збурення (колективного сліду) навколо двох включень. Із симетрії даної просторової конфігурації випливає, що y-компоненти сил з якими два включення діють одне на інше є рівними і протилежними, $f_{12}^y = -f_{21}^y$. При малих значеннях рівноважної концентрації ($n_0 < 1/2$), Рис. 2.1a, дисипативна взаємодія має характер відштовхування між включеннями, $f_{21}^y < 0$ і $f_{12}^y > 0$, див. Рис. 2.2. Якісно, це ефективне відштовхування просто пояснюється перекриттям індивідуальних збурень густини двох включень, яке призводить до формування між включеннями щільної області газу, що відіграє роль *відштовхувального бар'єру*, див. Рис. 2.1*а*. У протилежність, при $n_0 > 1/2$, перекриття індивідуальних збурень густини навколо включень призводить до формування перед включеннями протяжної щільної зони, яка блокує потік газу, так що область між включеннями стає збідненою. Як видно з Рис. 2.2, такий колективний ефект блокади частинок газу на двох включеннях призводить до ефективного притягання між ними при великій концентрації газу, $f_{21}^y > 0$ і $f_{12}^y < 0$. Зауважимо, з Рис. 2.2 також видно, що ефективна взаємодія між включеннями (f_{ij}^y) є ньютонівською і може бути описана за допомогою ефективного потенціалу.

У випадку $n_0 = 1/2$ ефективна взаємодія між включеннями зникає, $f_{12}^y = f_{21}^y = 0$, незалежно від відстані між ними. Дисипативна взаємодія також природно зникає в границі «пустого» середовища $n_0 \to 0$ і у випадку середовища повністю заповненого частинками $n_0 \to 1$.

Поздовжня конфігурація. (Рис. 2.3). При малій концентрації ($n_0 < 1/2$), має місце типова для броунівських систем ситуація: включення, потрапляючи в слід, створений іншим включенням, ефективно притягується до нього, оскільки сила тертя в збідненій частинками газу області є меншою [25, 29]. Такий випадок ефективної взаємодії часто називають *wake-mediated* [8,72]. Як видно з Рис. 2.4*б*, друге включення практично не впливає на перше, $f_{12}^x \approx 0$. В протилежність цьому, при великих концентраціях ($n_0 > 1/2$), друге включення не відчуває впливу першого, $f_{21}^x \approx 0$, в той час як перше потрапляє під дію щільної області газу, що утворилась перед другим включенням як результат ефекту блокади. У випадку $n_0 = 1/2$, ефективна взаємодія між включеннями набуває строго анти-ньютонового характеру, $f_{12}^x = f_{21}^x \neq 0$, див. Рис. 2.4*б*. В режимі блокади, при високій концентрації газу ($n_0 > 0.5$), друге включення «штовхає» перше назустріч потоку, тим самим зменшуючи величину повної сили тертя f_1^x, яка діє на перше включення, Рис. 2.4*а*. Зауважимо, що в протилежність до просторової конфігурації з поперечним розташуванням включень, сила на i-те включення, яку чинить k-те, не є непарною функцією від $1/2-n_0$, $f^x_{ij}(n_0) \neq -f^x_{ij}(1-n_0)$, тобто ефективна взаємодія між включеннями має явно виражений неньютонівський характер (Рис. 2.4*б*) і, як наслідок, не може бути представлена через ефективний потенціал (парну функцію). Однак, перемикання

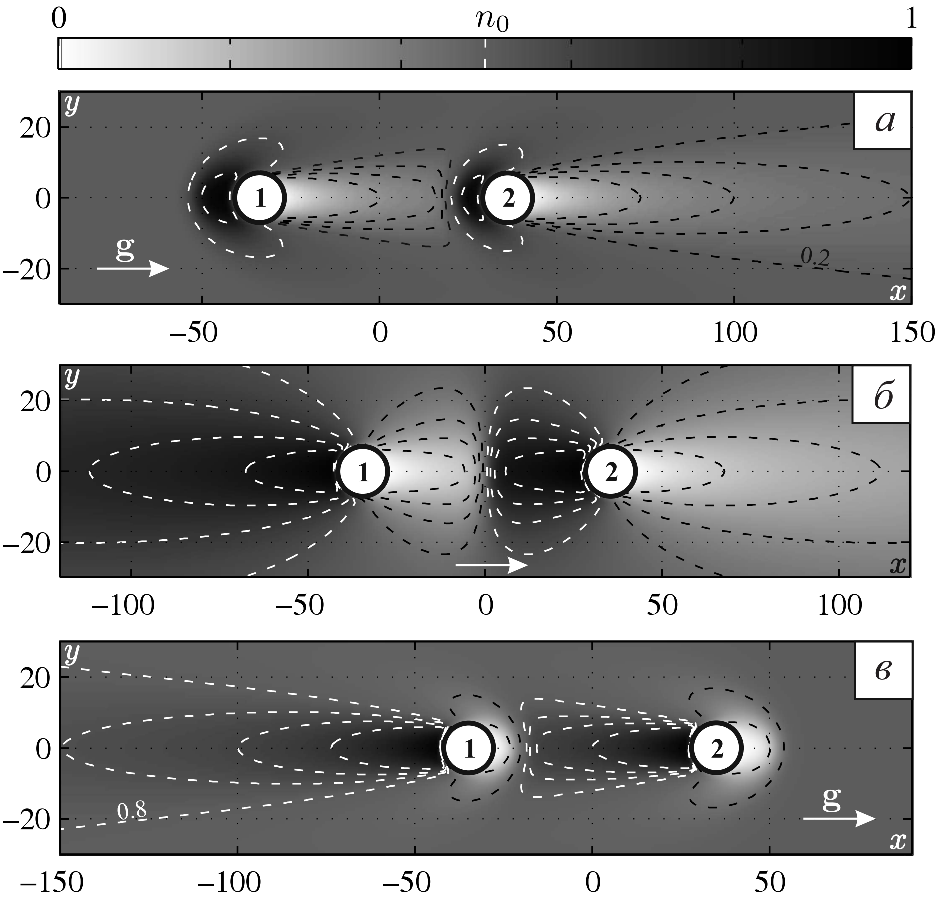


Рис. 2.3. *Поздовжня орієнтація.* Стаціонарний розподіл концентрації (середні числа заповнення) $\langle n(x_i, y_i)\rangle$ частинок газу навколо включень, розраховані чисельно на основі рівняння (1.2), для значень рівноважної концентрації $n_0 = 0.2$ (a), 0.5 ($б$) і 0.8 ($в$). Приведені розподіли ілюструють три різних режими дисипативної взаємодії, див. Рис. 2.4: (a) ефективне притягання ($|f^x_{21}| > |f^x_{12}|$), ($б$) анти-ньютонівська взаємодія ($f^x_{21} = f^x_{12}$), ($в$) ефективне відштовхування ($|f^x_{21}| < |f^x_{12}|$). Зовнішнє поле $\mathbf{g}$ ($|\mathbf{g}| = 0.5$) направлене вздовж OX; непроникні ($\bar{u} = 1$) круглі включення мають радіуси $a = 7$ (в одиницях ℓ), їх положення позначені чорними кільцями; відстань між центрами включень становить $10a$. Сірий колір тла відповідає рівноважній концентрації газу n_0 (для кожного розподілу) згідно колірної смуги вгорі; просторові координати наведено в одиницях ℓ.

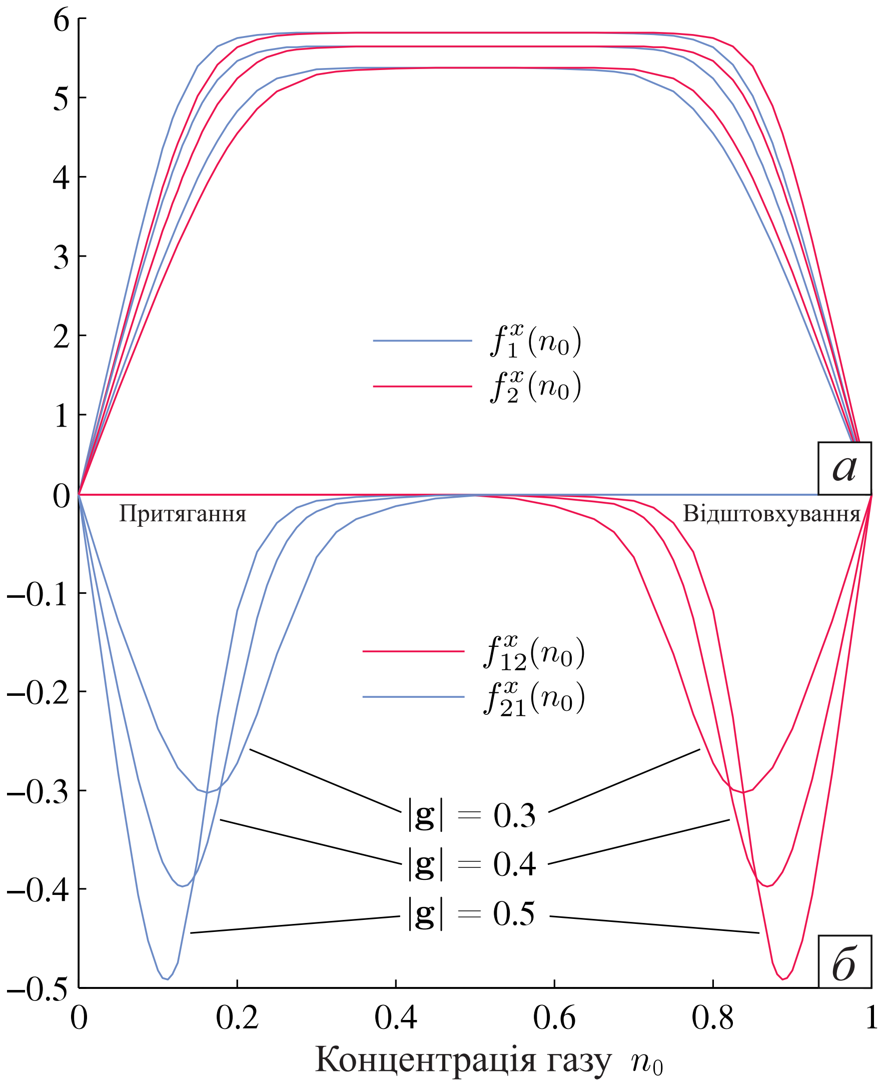


Рис. 2.4. *Поздовжнє розташування включень.* Концентраційна залежність повних сил $f_1^x(n_0)$ і $f_2^x(n_0)$, які діють на кожне включення (a), та сил $f_{12}^x(n_0)$ і $f_{21}^x(n_0)$, які діють між включеннями ($б$), для трьох значень зовнішнього поля $|\mathbf{g}| = 0.3, 0.4, 0.5$. Решта параметрів системи такі ж як на Рис. 2.3; сили приведені в одиницях kT/ℓ.

ефективної дисипативної взаємодії між включеннями з притягання на відштовхування відбувається: $f_{12}^x(n_0) - f_{21}^x(n_0) = -[f_{12}^x(1-n_0) - f_{21}^x(1-n_0)]$. Останній вираз дає більш загальний вигляд умови перемикання взаємодії при інверсії сліду.

Описану вище поведінку сил (Рис. 2.4) можна якісно пояснити використовуючи результати наближення лінійного потоку. Наприклад, для точкових включень при $n_0 < 1/2$, сили f_{12}^x та f_{21}^x, див. вираз (2.15), визначаються потенціалами $\propto \exp(-2qr_{12})/\sqrt{r_{12}}$ та $\propto 1/\sqrt{r_{21}}$, відповідно (див. асимптотичний вираз (А.15) в Додатку А], відтак $|f_{12}^x| \ll |f_{21}^x|$. Крім цього, метод потенціалу простого шару дає вірні головні асимптотики $f_{12}^x \sim |\mathbf{r}_{12}|^{-3/2}$ при великих значеннях $|\mathbf{r}_{12}|$, які добре узгоджуються з результатами числових розрахунків для загальної нелінійної задачі (1.2), див. пункт 2.5.

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 (на кшталт спільної нелінійної «поляризаційної шуби» густини [53]). Подібний за своєю природою ефект було отримано раніше в роботі [24] для випадку двох індикаторних частинок (tracers), що рухаються направлено під дією зовнішнього рушійного поля. Дійсно, при великій концентрації газу ($n_0 > 1/2$) збіднені на частинки каверни, які формуються навколо кожного включення (див. Рис. 2.1*в* чи 2.3*в*), 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 в пункті 2.5 (див. рисунки), що може бути ознакою ефекту дисипативного спарювання.

Залежність величини дисипативної взаємодії між включеннями від величини зовнішнього рушійного поля $\mathbf{g}$ виявляється не монотонною, Рис. 2.5. Характерний пік взаємодії відповідає тим значенням величини зовнішнього поля при яких найбільш виражене формування спільного збурення навколо пари включень. Таку поведінку можна якісно пояснити змінами форми збурень густини, наприклад, для випадку малої концентрації газу, $0 < n_0 < 1/2$ (Рис. 2.5*а*). В цьому випадку ефективне відштовхування між включеннями зникає в границі слабкого зовнішнього поля, оскільки «повільний» потік збідненого газу не створює суттєвих збурень густини і, відповідно, не спричиняє *wake-mediated* взаємодії. Характерний пік взаємодії відповідає величині зовнішнього поля за якої формується спільне (колективне) збурення густини (див. схематичні ілюстрації на Рис. 2.5*a*): в цьому режимі профіль розподілу густини забезпечує найбільш продуктивний взаємний вплив між включеннями через їх ефективну дисипатив-

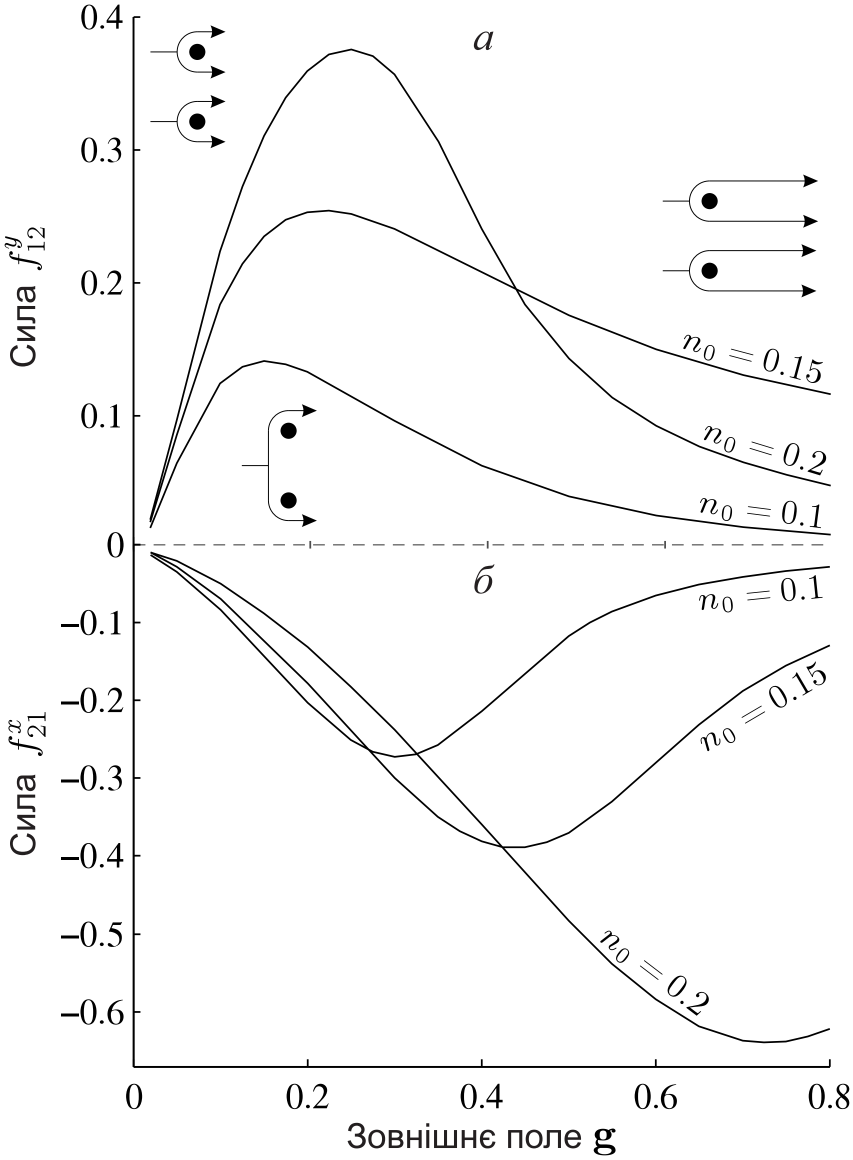


Рис. 2.5. Дисипативні сили (*a*) f_{12}^{y} (для поперечної конфігурації) та (*б*) f_{21}^{x} (для поздовжньої) як функції величини зовнішнього поля $\mathbf{g}$ для кількох значень концентрації газу: $n_0 = 0.1; 0.2; 0.3$. Розміри включень та відстані між ними відповідають тим, які приведені на Рис. 2.1 та 2.3; значення сил приведені в одиницях kT/ℓ. Для поперечної конфігурації наведено схематичні ілюстрації того як трансформується спільне збурення густини навколо пари включень.

ну взаємодію. Сильне зовнішнє поле зменшує латеральний розмір збурень навколо кожного включення, але збільшує їх поздовжню протяжність, так що в цілому збурення витягуються вздовж напрямку потоку. В результаті, перекриття індивідуальних збурень від кожного з включень зменшується і їх взаємний вплив зникає. Іншими словами, достатньо сильний дрейфовий потік редукує спільне (колективне) збурення. Аналогічне якісне обґрунтування є справедливим і для випадку ефективного притягання при поздовжній орієнтації включень. Зауважимо також, що положення піків зміщуються (а їх амплітуда зростає) в сторону сильнішого зовнішнього поля при зменшенні концентрації газу для випадку поздовжнього розташування включень (Рис. 2.5*б*), в той час як для поперечного розташування ситуація прямо протилежна (Рис. 2.5*а*). Таким чином, найбільш вигідні умови для організації *спільного* збурення визначаються як концентрацією частинок газу n_0 так і величиною зовнішнього поля $\mathbf{g}$.

Величину розрахованих сил можна легко оцінити, наприклад, для випадку атомів, адсорбованих на поверхні твердого тіла. Візьмемо сталу ґратки $\ell = 3$ Å, тоді при кімнатній температурі отримаємо характерну величину дисипативної сили близько 5–10 пН (див. Рис. 2.4*б*), а повна сили тертя має величину приблизно на порядок більшу (див. Рис. 2.4*а*). Зауважимо, що відношення між характерними значеннями сили тертя і дисипативної сили має таку ж величину як і у випадку пробних колоїдних частинок, що рухаються через колоїдну суспензію в тривимірному випадку [11, 12]. Крім цього, як видно з Рис. 2.4*а*, при концентраціях близьких до $n_0 = 1/2$ сили, що діють на кожне включення, практично рівні за величиною, тобто дисипативна взаємодія між включеннями набуває анти-ньютонового характеру, $f^x_{12} = f^x_{21}$, див. Рис. 2.4*б*. Слід зазначити, що аналогічна поведінка виникає для двох пробних частинок, що рухаються по прямій одна за одною через колоїдну суспензію: на обидві пробні частинки можуть діяти однакові за величиною сили, як це спостерігалося в недавньому експерименті [12] при ефективній концентрації суспензії 0.41. Однак, в останньому випадку ефект був зумовлений гідродинамічними взаємодіями між частинками середовища.

В окремому випадку відносно малих і досить далеко рознесених включень взаємодію між частинками газу можна врахувати в лінійному наближенні (пункт 1.3). Це наближення дозволяє отримати аналітичні вирази для асимптотичної поведінки як збурень густини на великих відстанях від включень, так і дисипативної взаємодії між ними. Цей випадок розглянуто в наступному підпункті.

2.5 Мультипольний характер дисипативної взаємодії, асоційований з несиметричним екранованим «потенціалом»

Тут нас буде цікавити асимптотична поведіка індукованої дисипативної взаємодії між далеко рознесеними домішками, коли можна знехтувати нелінійними ефектами. Як і в пункті 1.3, будемо розглядати *нерівноважний стаціонарний стан*, поклавши $\partial_\tau n = 0$ у рівнянні (3.1):

$$\nabla^2 n - U\nabla^2 n + n\nabla^2 U - (\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\nabla})n(1-n-U) = 0, \tag{2.11}$$

де включення задані розподілом U «важкої» компоненти газу. На великій відстані від включення (розмір якого порівнянний зі сталою ґратки) збурення густини $n = n_0 + \delta n$ слабо відхиляється від рівноважного значення n_0. В цьому випадку, взаємодія між частинками газу менш істотна і дрейфовий доданок в рівнянні (3.1) можна записати в лінійному наближенні $n^2 \approx n_0^2 + 2n_0\delta n$.

Прості аналітичні вирази для збурення густини і дисипативних сил в ансамблі далеко рознесених малих включень можна отримати використовуючи якісний підхід описаний в Додатку А. Цей підхід подібний до того, який базується на методі молекулярного поля і був використаний для опису пружних взаємодій між колоїдними частинками в рідкому кристалі, див. [58, 97, 98]. Зокрема, збурення густини газу на великих відстанях від ізольованого включення можна записати як

$$\delta n(\mathbf{r}) \sim \left(\overline{\mathbf{\Omega}}, \nabla_{\mathbf{r}}\right) G(\mathbf{r}), \tag{2.12}$$

де $G(\mathbf{r})$ — анізотропний екранований потенціал кулонівського типу, який має вигляд

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-q|\mathbf{r}|+\mathbf{qr}}}{|\mathbf{r}|} \tag{2.13}$$

у тривимірному випадку та

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} e^{\mathbf{qr}} K_0(q|\mathbf{r}|) \tag{2.14}$$

у двовимірному. Тут, K_0 — модифікована функція Бесселя, вектор $\mathbf{q} = (1/2 - n_0)\mathbf{g}$ визначає виділений напрямок екранування і залежить від зовнішнього поля $\mathbf{g}$ («швидкості» потоку газу) та від рівноважної концентрації газу n_0. $\overline{\mathbf{\Omega}}$ відіграє роль ефективного індукованого дипольного моменту включення, див. Додаток А.

При малих концентрація газу ($n_0 < 1/2$), щільна область газу перед включенням описується експоненційною асимптотикою, в той час як асимптотика збідненої області позаду включення — степенева. Коли концентрація газу зростає і n_0 стає більшою $1/2$, вектор анізотропії $\mathbf{q} = (1/2 - n_0)\mathbf{g}$ змінює свій напрямок на протилежний. Це означає, що перемикання направленості сліду, інверсія сліду, виникає одночасно з відповідним перемиканням між експоненційною та степеневою асимптотиками. Розподіл $\delta n(\mathbf{r})$, пов'язаний з анізотропним екранованим кулонівським потенціалом, формально описує «поляризацію середовища» навколо включення, індуковану асиметричним «диполем» (див., наприклад, Рис. 2.1).

У випадку ансамбля рознесених включень, сила на k-те включення з боку i-го може бути грубо оцінена як (див. Додаток А)

$$\boldsymbol{f}_{ki} \sim -\nabla_{\mathbf{R}_k} \left(\overline{\boldsymbol{\Omega}}_i, \nabla_{\mathbf{R}_k}\right) G(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_i), \tag{2.15}$$

де $\mathbf{R}_k$ — центр k-го включення. Анізотропний екранований кулонівський потенціал G, який дає асиметричну форму сліду включення (2.12), природним чином визначає неньютонів характер дисипативних сил, що діють між включеннями, $\boldsymbol{f}_{ki} \neq -\boldsymbol{f}_{ik}$. Як видно з виразів (2.12) та (2.15), асимптотична поведінка збурення густини та дисипативних сил між далеко рознесеними малими включеннями визначається моментами екранованого анізотропного кулонівського потенціалу. Локальне збурення густини навколо включення формується ефективним потоком $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_i$, який визначається зовнішнім потоком та потоками, індукованими збуреннями густини газу від усіх решти включень. Останнє означає, що взаємодія між двома включеннями не може бути відділена від впливу всіх інших включень. Це є загальною властивістю нелінійного відгуку або нелінійних систем, див. [58]. Формально, вираз (2.15) описує індуковану диполь-дипольну взаємодію між асиметричними точковими диполями в нерівноважному стаціонарному стані, де ефективний індукований дипольний момент i-го включення $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_i$ має відмінний від нуля повний «заряд». Основний внесок в цю взаємодію дає вплив i-го диполя на «нескомпенсований індукований заряд» k-го асиметричного диполя. Зауважимо, що форма δn та $\boldsymbol{f}_{kj}$, яка відповідає нелінійному відгуку, подібна до форми лінійного відгуку для рухомих пробних частинок (див. [69]), лише з тою різницею, що поведінка асимптотик визначається анізотропним екранованим кулонівським потенціалом замість звичайного кулонівського $|\mathbf{r}|^{-1}$, а замість швидкості пробної частинки фігурує середній потік газу (середнє поле) поблизу включення. Однак, вирази (2.12) та (2.15) отримані в рамках досить грубого підходу і дають лише якісну картину дисипативної взаємодії для точкових включень.

Метод вторинних поверхневих джерел (потенціал простого шару). Більш точні результати стосовно поведінки слідів та дисипативних сил можна отримати користуючись методом потенціалу простого шару для включень скінченного розміру і з різкою межею. Знову, будемо відштовхуватись від рівняння (2.11). Зручно перейти до функції $\psi(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r})/[1 - u(\mathbf{r})]$, що задовольняє рівняння

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \{\varepsilon \left[\boldsymbol{\nabla}\psi - \psi\left(1 - \psi\right)\mathbf{g}\right]\} = 0, \tag{2.16}$$

де $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r}) = [1 - u(\mathbf{r})]^2$ і вважається, що $u(\mathbf{r}) \neq 1$. Представимо розв'язок $\psi(\mathbf{r}) \approx \psi_0 + \delta\psi(\mathbf{r})$ як невелике відхилення $\delta\psi(\mathbf{r})$ від рівноважного розподілу $\psi_0 \equiv n_0$, і лінеаризуємо рівняння (2.16):

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\varepsilon\left(\boldsymbol{\nabla}\delta\psi - 2\mathbf{q}\delta\psi - \mathbf{Q}\right)\right] = 0, \tag{2.17}$$

де $\mathbf{Q} = n_0(1 - n_0)\mathbf{g}$ і $\mathbf{q} = (1/2 - n_0)\mathbf{g}$. Це лінійне рівняння враховує взаємодію між частинками газу в першому порядку теорії збурень. В цьому сенсі, (2.17) є узагальненням рівняння Смолуховського, яке використовувалось в [25] для невзаємодіючого газу при малій його концентрації.

Включення представлені розподілами «важкої» компоненти газу $u_j(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$, зцентрованими в точках $\mathbf{R}_j$, з однорідною концентрацією $u_j(\mathbf{r}) = \bar{u}_j = \text{const}$ всередині включень та $u_j(\mathbf{r}) \equiv 0$ зовні. Зауважимо, що у випадку включень з різкою межею рівняння (2.16) допускає розв'язки в класі неперервних функцій, в той час як функція $n(\mathbf{r})$, що задовольняє рівняння (A.1), і похідна по нормалі від неї мають скачок на межі включення. Збурення густини всередині ($\delta\psi^-$) та зовні ($\delta\psi^+ \equiv \delta n$) включень задовольняють рівняння

$$\nabla\left(\nabla\delta\psi^{\pm} - 2\mathbf{q}\delta\psi^{\pm} - \mathbf{Q}\right) = 0. \tag{2.18}$$

Рівняння (2.18) доповнюють умови зшивки для $\delta\psi^{\pm}$ на поверхні i-го включення S_i:

$$\begin{aligned}\delta\psi^{+}(\mathbf{r}) = \delta\psi^{-}(\mathbf{r}), \qquad \varepsilon^{+}\left[\nabla^{+}_{\mathbf{n}}\delta\psi^{+}(\mathbf{r}) - 2q_n\delta\psi^{+}(\mathbf{r}) - Q_n\right] &= \\ =\varepsilon^{-}_{i}\left[\nabla^{-}_{\mathbf{n}}\delta\psi^{-}(\mathbf{r}) - 2q_n\delta\psi^{-}(\mathbf{r}) - Q_n\right]&,\end{aligned} \tag{2.19}$$

де $Q_n = (\mathbf{Q}, \mathbf{n}_{\mathbf{r}})$, $q_n = (\mathbf{q}, \mathbf{n}_{\mathbf{r}})$, $\mathbf{n}_{\mathbf{r}}$ — зовнішня нормаль в точці $\mathbf{r} \in S_i$, $\varepsilon^{+} = 1$ зовні і $\varepsilon^{-}_{i} = (1 - \bar{u}_i)^2$ всередині i-го включення; використано позначення $\nabla^{\pm}_{\mathbf{n}}(\ldots) \equiv \lim_{|\widetilde{\mathbf{r}}-\mathbf{R}_i| \to |\mathbf{r}-\mathbf{R}_i| \pm 0}\left(\frac{\partial(\ldots)}{\partial\mathbf{n}}\right)(\widetilde{\mathbf{r}})$.

Розв'язок (2.18)–(2.19) можна представити у формі потенціалу простого шару, так само як це було зроблено у розділі 1.3 для одинокого включення,

$$\delta\psi(\mathbf{r}) = \sum_i \int\limits_{S_i} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mu_i(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}\mathbf{r}', \tag{2.20}$$

де $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — Ґрінова функція (вираз (2.13) для тривимірного, або (2.14) для двовимірного випадку), яка формально відповідає анізотропному несиметричному екранованому кулонівському «потенціалу». Величина $\mu_i(\mathbf{r}')$ відіграє роль густини «заряду», індукованої зовнішнім полем $\mathbf{g}$ на поверхні S_i включення [87]. Вона задовольняє наступне інтегральне рівняння, яке дають умови зшивки (2.19):

$$2\lambda_i\left[\nabla^{+}_{\mathbf{n}} - 2q_n(\mathbf{r}_i)\right]\sum_j \int\limits_{S_j} G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\mu_j(\mathbf{r}_j)\,\mathrm{d}\mathbf{r}_j + (\lambda_i - 1)\mu_i(\mathbf{r}_i) = 2\lambda_i Q_n(\mathbf{r}_i), \tag{2.21}$$

де $\mathbf{r}_i \in S_i$, а $\lambda_i = \lambda(\bar{u}_i) = (\varepsilon^{+} - \varepsilon^{-}_{i})/(\varepsilon^{+} + \varepsilon^{-}_{i})$. Рівняння (2.21) отримано з використанням теореми про стрибок нормальної похідної потенціалу простого шару на поверхні включення [86], $\nabla^{\pm}_{\mathbf{n}}\delta\psi^{\pm}(\mathbf{r}) = \mp\mu(\mathbf{r})/2 + \nabla_{\mathbf{n}}\delta\psi(\mathbf{r})$. Представлення (2.20) та (2.21) описують загальний розв'язок для включень з довільною геометрією поверхонь (поверхня Ляпунова [86]).

Пам'ятаючи, що $\delta\psi^{+}(\mathbf{r}) \equiv \delta n(\mathbf{r})$, і використовуючи (2.8), можемо записати остаточний вираз для збурення густини навколо включень та сили на включення (і те й інше індуковане зовнішнім полем $\mathbf{g}$, яке створює потік частинок газу):

$$\delta n(\mathbf{r}) = \sum_j \int\limits_{S_j} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)\mu_j(\mathbf{r}_j)\,\mathrm{d}\mathbf{r}_j, \tag{2.22}$$

$$\boldsymbol{f}_k = -\sum_j \int\limits_{S_k}\int\limits_{S_j} \mathbf{n}(\mathbf{r}_k)G(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j)\mu_j(\mathbf{r}_j)\,\mathrm{d}\mathbf{r}_k\mathrm{d}\mathbf{r}_j. \tag{2.23}$$

Таке представлення розв'язку має пряму аналогію з індукованою взаємодією між діелектричними частинками в стаціонарному електричному полі $\mathbf{Q}$: зовнішнє електричне поле індукує заряд μ на поверхні частинки, так що вона поляризується, наприклад, індукуючи дипольний момент для сферичної частинки [6]. Це, в свою чергу, призводить до мультипольної (наприклад, диполь-дипольної) взаємодії між частинками. Однак, в нашому випадку, на відміну від електростатичної задачі, густина μ_k індукована зовнішнім полем (потоком) на поверхнях включень і мультипольну взаємодію між ними визначає не кулонівський потенціал $|\mathbf{r}|^{-1}$ а анізотропний екранований кулоноподібний «потенціал» $|\mathbf{r}|^{-1}\exp(\mathbf{qr} - q|\mathbf{r}|)$ (в тривимірному випадку). Така форма «потенціалу» призводить, зокрема, до незбереження індукованої поверхневої густини, $\int \mu\,\mathrm{d}S \neq 0$, та до асиметричного розподілу «індукованого потенціалу» δn поблизу включення. Останній описує асиметричний слід від включення, наприклад, слід з компактною областю щільного газу перед включенням та протяжним збідненим хвостом з протилежної сторони (див., наприклад, Рис. 2.1a).

В окремому випадку напівзаповненої системи ($n_0 = 1/2$), другий доданок в рівнянні (2.17) зникає ($\mathbf{q} \equiv 0$) і задача формально зводиться до стандартної електростатичної задачі $\nabla \left[\varepsilon (\nabla \delta\psi - \mathbf{Q}) \right] = 0$ для діелектричної частинки в однорідному електричному полі $\mathbf{Q} = \mathbf{g}/4$. В цьому випадку розподіл густини $\delta\psi(\mathbf{r})$ близький до розподілу електростатичного потенціалу, який характеризує розсіяне поле. Це означає, що індукована взаємодія між включеннями опосередкована їх спільним оточенням (збуренням густини) поводить себе подібно до електростатичної диполь-дипольної (в загальному, мультипольної) взаємодії. Для одинокого включення з радіусом a збурення густини $\delta n = \delta\psi^+$ навколо включення при $n_0 = 1/2$ можна отримати в явній формі: $\delta n = \lambda a^2 (\mathbf{Q}, \nabla_\mathbf{r}) \ln a |\mathbf{r}|^{-1}$ для двовимірного випадку і $\delta n = \lambda a^2 (\mathbf{Q}, \nabla_\mathbf{r}) |\mathbf{r}|^{-1}$ для тривимірного. Ці вирази пояснюють як степеневу асимптотичну поведінку збурення газу так і симетрію направленості хвоста сліду «вперед-назад», див. розділ 1.2. Цей окремий випадок ($n_0 = 1/2$) відповідає лінійному відгуку δn на зовнішнє поле $\mathbf{g}$, див. [69]. Зазначимо, що симетричність сліду (профілю збурення), породженого в середовищі рухомою пробною частинкою, є загальним результатом для систем описуваних в наближенні лінійного відгуку (див., наприклад, [17]).

Для далеко рознесених включень, коли відстань між їх центрами $|\mathbf{r}_{kj}| = |\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j|$ є набагато більшою ніж їх характерні розміри a_j, $|\mathbf{r}_{kj}| = |\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j| \gg a_k(a_j)$, можна використати мультипольний розклад потенціалу G:

$$G(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j) \approx G(\mathbf{r}_{kj}) + \left(\mathbf{x}_{kj} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_{kj}} \right) G(\mathbf{r}_{kj}) + \cdots , \tag{2.24}$$

де $\mathbf{x}_{kj} = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i$ і $\mathbf{x}_k = \mathbf{r}_k - \mathbf{R}_k$. Далі розглянемо окремий тривимірний випадок зі сферичними включеннями радіусу a_k. Для включень розташованих далеко одне від одного, $|\mathbf{r}_{ki}| \gg |\mathbf{x}_{ki}|$, можна використати мультипольний розклад (2.24) для ядра інтегрального оператора в (2.21). В дипольному наближенні інтегральне рівняння для індукованої поверхневої густини $\mu_k(\mathbf{x}_k)$

на поверхні k-го включення набуває вигляду

$$\hat{\Lambda}_{\mathbf{x}_k}\,\mu_k(\mathbf{x}_k) + \mathbf{x}_k\left(\nabla^{+}_{\mathbf{x}_k} - 2\mathbf{q}\right)\sum_{i\neq k}\frac{e^{-q|\mathbf{r}_{ki}|+\mathbf{q}\mathbf{r}_{ki}}}{4\pi|\mathbf{r}_{ki}|}\int\limits_{S_i}(1+\mathbf{x}_{ki}\mathbf{u}_{ki})\,\mu_i(\mathbf{x}_i)\,\mathrm{d}\mathbf{x}_i \;=\; \mathbf{x}_k\mathbf{Q}, \tag{2.25}$$

де

$$\mathbf{u}_{ki}(\mathbf{r}_{ki}) = \mathbf{q} - q\frac{\mathbf{r}_{ki}}{|\mathbf{r}_{ki}|} - \frac{\mathbf{r}_{ki}}{|\mathbf{r}_{ki}|^2}, \tag{2.26}$$

а $\hat{\Lambda}_{\mathbf{x}_k}$ позначає інтегральний оператор для одинокого включення

$$\hat{\Lambda}_{\mathbf{x}_k}\,\mu_k(\mathbf{x}_k) = a_k\frac{\lambda_k-1}{2\lambda_k}\mu_k(\mathbf{x}_k) + \mathbf{x}_k\left(\nabla^{+}_{\mathbf{x}_k} - 2\mathbf{q}\right)\int\limits_{S_k}\frac{e^{-q|\mathbf{x}_{kk}|+\mathbf{q}\mathbf{x}_{kk}}}{4\pi|\mathbf{x}_{kk}|}\,\mu_k(\mathbf{x}'_k)\,\mathrm{d}\mathbf{x}'_k. \tag{2.27}$$

Рівняння (2.25) для μ_k має малий параметр $\exp\left(-q|\mathbf{r}_{ki}| + \mathbf{q}\mathbf{r}_{ki}\right)/4\pi|\mathbf{r}_{ki}| \ll 1$, що дозволяє розглянути вплив усіх інших включень на задане як невелике збурення μ_k^1 розв'язку $\mu_k^0 = \mu^0$ для одинокого включення, $\mu_k \approx \mu_k^0 + \mu_k^1$. В такому наближенні рівняння на $\mu_k^0 = \mu^0$ і μ_k^1 набувають вигляду

$$\hat{\Lambda}_{\mathbf{x}_k}\,\mu_k^0(\mathbf{x}_k) = \;\mathbf{x}_k\mathbf{Q}, \tag{2.28}$$

$$\hat{\Lambda}\,\mu_k^1(\mathbf{x}_k) \;=\; -\mathbf{x}_k\left(\nabla_{\mathbf{x}_k} - 2\mathbf{q}\right)\sum_{i\neq k}\frac{e^{-q|\mathbf{r}_{ki}|+\mathbf{q}\mathbf{r}_{ki}}}{4\pi|\mathbf{r}_{ki}|}\int\limits_{S_i}(1+\mathbf{x}_{ki}\mathbf{u}_{ki})\,\mu_i^0(\mathbf{x}_i)\,\mathrm{d}\mathbf{x}_i. \tag{2.29}$$

Формальний розв'язок останнього рівняння можна записати як

$$\mu_k^1(\mathbf{x}_k) \;=\; \sum_{i\neq k}\frac{e^{-q|\mathbf{r}_{ki}|+\mathbf{q}\mathbf{r}_{ki}}}{4\pi|\mathbf{r}_{ki}|}\hat{\Lambda}^{-1}_{\mathbf{x}_k}\int\limits_{S_i}W(\mathbf{x}_k,\mathbf{x}_i,\mathbf{r}_{ki})\,\mu_i^0(\mathbf{x}_i)\,\mathrm{d}\mathbf{x}_i, \tag{2.30}$$

де

$$W(\mathbf{x}_k,\mathbf{x}_i,\mathbf{r}_{ki}) = 2(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_k)(1+\mathbf{x}_{ki}\cdot\mathbf{u}_{ki}) - \mathbf{x}_k\cdot\mathbf{u}_{ki}. \tag{2.31}$$

Дисипативну силу, що діє на включення, визначає збурення густини газу $\delta n(\mathbf{r})$ на поверхні включення, вираз (2.8). В такому випадку можемо покласти $\delta n \approx \delta\psi(\mathbf{r})$, де $\mathbf{r} \approx \mathbf{R}_k + \mathbf{x}_k$ і $|\mathbf{x}_k| = a_k$ — радіус k-го включення. В дипольному наближенні, рівняння (2.24), (2.28) і (2.29), збурення густини навколо k-го включення можна записати у вигляді

$$\delta n_k \approx \delta n_k^0 + \int\limits_{S_k} G(\mathbf{x}_{kk})\mu_k^1(\mathbf{x}'_k)\,\mathrm{d}\mathbf{x}'_k + \\ + \sum_{i\neq k}\int\limits_{S_i}\left[G(\mathbf{r}_{ki}) + (\mathbf{x}_{ki}\cdot\nabla_{\mathbf{r}_{ki}})\,G(\mathbf{r}_{ki})\right]\mu_i^0(\mathbf{x}'_k)\,\mathrm{d}\mathbf{x}'_k. \tag{2.32}$$

Права частина виразу (2.32), яка містить суму по всіх включеннях $i \neq k$, описує їх прямий вплив на дане k-те включення. Перший доданок в рівнянні (2.32)

$$\delta n_k^0 = \int\limits_{S_k} G(\mathbf{x}_{kk})\mu_k^0(\mathbf{x}_k)\,\mathrm{d}\mathbf{x}'_k \tag{2.33}$$

дає вклад в збурення газу навколо k-го включення, породжений самим k-им включенням.

Використовуючи рівності (2.30) та (2.32), внесок в збурення густини δn_k навколо k-го включення зумовлений рештою включень у тривимірному випадку можна записати як

$$\delta n_k - \delta n_k^0 \approx \sum_{i\neq k}\delta n_{ki}, \tag{2.34}$$

де

$$\delta n_{ki} \sim \frac{e^{-q|\mathbf{r}_{ki}|+\mathbf{q}\mathbf{r}_{ki}}}{4\pi|\mathbf{r}_{ki}|} I\left(\mathbf{r}_{ki},\mathbf{q},\mathbf{x}_k\right) \tag{2.35}$$

— це внесок i-го включення в збурення густини біля поверхні k-го включення,

$$I\left(\mathbf{r}_{ki},\mathbf{q},\mathbf{x}_k\right) = \int\limits_{S_i}\Big[\left(1+\mathbf{x}_{ki}\mathbf{u}_{ki}\right)\mu_i^0(\mathbf{x}'_i) +$$

$$+\int\limits_{S_k} \frac{e^{-q|\mathbf{x}_{kk}|+\mathbf{q}\mathbf{x}_{kk}}}{4\pi|\mathbf{x}_{kk}|}\hat{\Lambda}^{-1}_{\mathbf{x}'_k} W(\mathbf{x}'_k, \mathbf{x}'_i, \mathbf{r}_{ki})\, \mu^0_i(\mathbf{x}'_i)\mathrm{d}\mathbf{x}'_k\Bigg]\,\mathrm{d}\mathbf{x}'_i. \tag{2.36}$$

Як видно з виразу (2.36), $I\left(\mathbf{r}_{ki}, \mathbf{q}, \mathbf{x}_k\right)$ має степеневу залежність від $\mathbf{r}_{ki}$ 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 $\mathbf{g}$.

Використовуючи вираз (2.35) для збурення густини δn_k, можемо представити силу на k-те включення з боку i-го у формі, подібній до (A.13):

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}_{ki} &\approx -\int\limits_{S_k} \mathbf{n}(\mathbf{x}_k)\delta n_{ki}(\mathbf{x}_k)\,\mathrm{d}\mathbf{x}_k \\ &= -\frac{e^{-q(1-\beta\cos\theta_{ki})|\mathbf{r}_{ki}|}}{4\pi|\mathbf{r}_{ki}|}\int\limits_{S_k} \mathbf{n}(\mathbf{x}_k) I\left(\mathbf{r}_{ki}, \mathbf{q}, \mathbf{x}_k\right)\,\mathrm{d}\mathbf{x}_k.\end{aligned} \tag{2.37}$$

Вирази (2.35)–(2.37) отримані в дипольному наближенні і наближено описують асимптотичну поведінку індукованих нерівноважних кореляції та дисипативних сил між двома включеннями, розташованими далеко одне від одного, в залежності від відстані між ними $|\mathbf{r}_{ik}|$ та їх взаємної просторової орієнтації θ_{ik} по відношенню до зовнішнього поля $\mathbf{g}$. З виразів (2.35)–(2.37) зрозуміло, що вплив i-го включення на k-те не є еквівалентним до впливу k-го включення на i-те ($\theta_{ki} = \pi - \theta_{ik}$), тобто ці кореляції невзаємні (*nonreciprocal*), $\delta n_{ki} \neq \delta n_{ik}$, а сили — неньютонові, $\boldsymbol{f}_{ki} \neq -\boldsymbol{f}_{ik}$.

Як видно з (2.37), дисипативні сили, що діють між включеннями, виражаються (в дипольному наближенні) в термінах індукованої густини μ^0 ізольованого включення. Розподіл $n^0(\mathbf{r}) = n_0 + \delta n^0(\mathbf{r})$ для одинокого включення в тривимірному випадку має вигляд

$$n^0(\mathbf{r}) = n_0 + \int\limits_{S} \frac{e^{\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-q|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\mu^0(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}\mathbf{r}'. \tag{2.38}$$

На великій відстані від включення, коли $|\mathbf{r}| \gg a$ (a — характерний розмір включення), можемо легко виокремити головну асимптотику збурення густини газу δn, індукованого полем $\mathbf{q} = (1/2 - n_0)\mathbf{g}$:

$$\delta n(\mathbf{r}) \approx \frac{e^{\mathbf{qr} - q|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|}\tilde{I}(\mathbf{r}, \mathbf{q}), \tag{2.39}$$

пор. з (А.6). $\tilde{I}(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ відповідає за зміну знаку δn в залежності від направленості $\mathbf{r}$ і, в свою чергу, залежить від $|\mathbf{r}|$ згідно степеневого закону.

Поведінка $\tilde{I}(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ у випадку сферичного включення визначається асимптотикою функції Бесселя $K_{m+\frac{1}{2}}(qr)$ [89]:

$$\delta n^0 \approx \sqrt{2\pi} a^2 \frac{e^{-qr(1-\beta\cos\theta)}}{r}\tilde{I}(\mathbf{r}, \mathbf{q}), \tag{2.40}$$

$$\tilde{I} \approx \sum_{m=0} \alpha_m \left(1 + \frac{m^2 + m}{2qr} + \cdots\right) \frac{I_{m+\frac{1}{2}}(qa)}{\sqrt{qa}} P_m(\cos\theta), \tag{2.41}$$

де $\alpha_m = \alpha_m(qa)$ залежить лише від радіусу включення $a_k = a$ і від зовнішнього поля $\mathbf{q}$. α_m — коефіцієнти розкладу за поліномами Лежандра $\mu^0(\theta) = e^{\beta qa\cos\theta} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n P_n(\cos\theta)$ на поверхні включення і їх можна отримати як розв'язок рівняння (2.21), θ — кут між $\mathbf{r}$ і $\mathbf{g}$, $\beta = (1/2 - n_0)/|1/2 - n_0| = \pm 1$. Розподіл $\delta n^0(\mathbf{r})$ для ізольованого круглого включення у двовимірному випадку приведено в пункті 1.3 Розділу 1. В окремому випадку $n_0 < 1/2$, дипольне наближення дає наступні розподіли збурення газу: пред включенням, $\mathbf{qr} = -qr$,

$$\delta n(r) \approx b e^{-2qr} \left\{ [3c + 1] (qr)^{-\frac{1}{2}} + \frac{3}{8} [c + 1] (qr)^{-\frac{3}{2}} \right\}, \tag{2.42}$$

і позаду включення, $\mathbf{qr} = qr$,

$$\delta n(r) \approx -b \left\{ (qr)^{-\frac{1}{2}} + \frac{3}{8} [2c + 1] (qr)^{-\frac{3}{2}} \right\}. \tag{2.43}$$

Тут, константи

$$c = 2\left[3(qa)K_1(qa)I_2(qa)\right]^{-1} \quad \text{і} \quad b = \sqrt{8\pi}n_0(1-n_0)|1-2n_0|^{-1}I_2(qa)K_2^{-1}(qa)$$

виражаються через модифіковані функції Бесселя I_n та K_n; a — радіус непроникного включення ($\lambda \to 1$). У випадку точкового включення, $qa \sim q\ell \ll 1$, цей метод дає $\delta n \sim e^{-2qr}r^{-1/2}$ для області перед включенням та $\delta n \sim -r^{-3/2}$ для асимптотики хвоста. Цей результат якісно узгоджується з чисельним і співпадає з асимптотичною поведінкою релаксації сліду від рухомого трейсера [19]. Загальний вигляд дисипативної сили у двовимірному випадку аналогічний (2.37):

$$\boldsymbol{f}_{ki} \propto -\frac{e^{-q|\mathbf{r}_{ki}|+\mathbf{q}\mathbf{r}_{ki}}}{|\mathbf{r}_{ki}|^{1/2}} \int\limits_{S_k} \mathbf{n}(\mathbf{x}_k) I(\mathbf{r}_{ki}, \mathbf{q}, \mathbf{x}_k)\, \mathrm{d}\mathbf{x}_k. \tag{2.44}$$

Можна легко показати, що для поздовжнього розташування включень $\mathbf{u}_{12}(\mathbf{r}_{12}) = -\mathbf{r}_{12}/|\mathbf{r}_{12}|^2$, а головна асимптотика поводить себе як $f_{12}^x \approx A|\mathbf{r}_{ki}|^{-3/2}$, що також узгоджується з чисельно розрахованим результатом для нелінійної задачі (1.2), див. Рис. 2.6a, коли відстань між включеннями $|\mathbf{r}_{ki}|$ набагато більша ніж їх радіуси a_i. Формфактор A залежить лише від зовнішнього поля $\mathbf{g}$ і радіусу включення a. Для поперечного розташування, головна асимптотика сили поводить себе експоненційно, $\ln f_{12}^y \propto -q|\mathbf{r}_{12}| + \cdots$, що також знаходиться в якісному узгодженні з чисельними результатами, див. Рис. 2.6*б*.

Основним результатом цього підпункту є те, що ефективна дисипативна взаємодія між малими і віддаленими включеннями, виражена у формі (2.15) або (2.37), належить до взаємодії типу індукованої диполь-дипольної (взагалі, мультипольної) в нерівноважному стаціонарному стані. На відміну від звичайної електростатичної взаємодії між поляризовними частинками в електричному полі, вирази (2.15) та (2.37) описують взає-

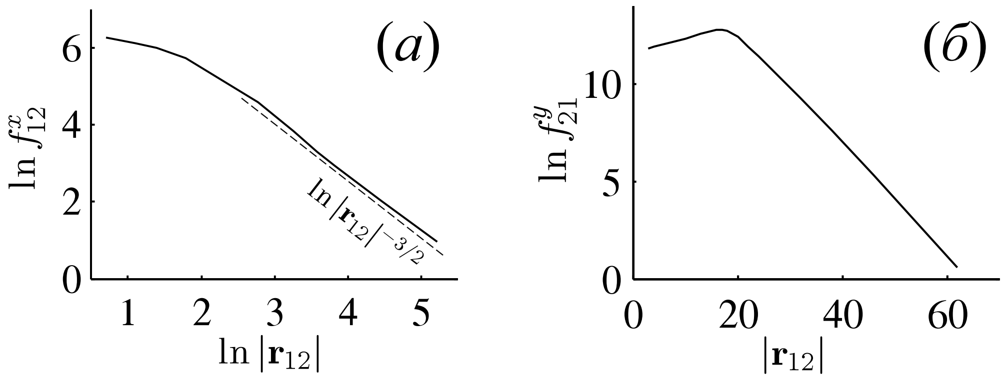


Рис. 2.6. Асимптотична поведінка дисипативних сил (a) f_{12}^x (поздовжнє розташування) та ($б$) f_{12}^y (поперечне розташування) у випадку, коли включення рознесені на велику відстань r_{12}. Штрихова лінія на (a) відповідає асимптотиці $f_{12}^x \sim r_{12}^{-3/2}$. Концентрація газу $n_0 = 0.8$, зовнішнє поле $\mathbf{g}$ ($|\mathbf{g}| = 0.5$) направлене вздовж OX, непроникні круглі включення обидва мають радіус $a = 7$ (в одиницях ℓ), сили приведені в одиницях kT/ℓ.

модію між індукованими «асиметричними» диполями (з ненульовим повним індукованим «зарядом»), яка асоційована з анізотропним екранованим кулонівським потенціалом з виділеним напрямком анізотропії $\mathbf{q}$. Зазначимо, що наближення лінійного потоку також дозволяє описати розглянутий в пункті 2.3 ефект концентраційного перемикання дисипативної взаємодії між включеннями. Це наближення 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.

2.6 Висновки

Стисло підсумуємо основні результати цього розділу, які стосуються дисипативної взаємодії між включеннями в потоці газу з урахуванням короткосяжного відштовхування між частинками газу.

- Показано, що підвищення концентрації газу посилює роль міжчастинкової взаємодії і може призводити до зміни знаку ефективної взаємодії між включеннями, тобто до «перемикання» з ефективного притягання на відштовхування чи навпаки. Такий ефект концентраційного перемикання сил пов'язаний з трансформацією слідів включень — їх інверсією.

- Показано, що для малих і далеко рознесених включень дисипативна (*wake-mediated*) взаємодія між ними належить до типу індукованої диполь-дипольної (в загальному випадку, мультипольної) взаємодії, асоційованої з анізотропним екранованим кулонівським потенціалом. З цією метою було запропоновано представлення збурення густини газу у вигляді потенціалу простого шару. Формально, його можна розглядати як узагальнення методу потенціалу простого шару для електростатичної взаємодії між поляризовними частинками в стаціонарному зовнішньому полі. Запропонований підхід є застосовним до нерівноважних стаціонарних станів (систем), коли взаємодія між включеннями породжується потоком газу. Отримані аналітичні вирази дають якісне пояснення асиметрії сліду включення, далекосяжного характеру дисипативної взаємодії, її неньютонового характеру та ефекту перемикання, як сліду так і дисипативної сили.
- Дисипативна взаємодія проявляється сильніше тоді, коли формується колективний слід (спільне збурення густини). Сила залежить немонотонним чином від концентрації газу, величини зовнішнього рушійного поля («швидкості» потоку) та взаємного розташування включень. Зокрема, при низьких концентраціях два включення ефективно притягаються у випадку їх поздовжнього розташування, але відштовхуються у випадку поперечного. При великих же концентраціях ситуація прямо протилежна.
- Нелінійний ефект блокади частинок газу є істотним поблизу поверхонь відносно великих включень та/або близько розташованих включень. В цьому випадку, як було показано, міжчастинкове від-

штовхування призводить до екранування потоку газу біля включень і до формування навколо них спільного збурення густини з вираженим кінковим профілем. Такий характер спільного збурення може обумовлювати нелінійний механізм дисипативного спарювання включень (див. [45]).

Основні результати розділу опубліковані в праці [69].

РОЗДІЛ 3
ЕФЕКТИ КОЛЕКТИВНОГО РОЗСІЯННЯ ПОТОКУ ГАЗУ НА СУКУПНОСТІ ДОМІШОК

3.1 Вступ

В попередніх розділах, ми розглядали властивості сліду при розсіянні потоку частинок на одній домішці та поведінку індукованої дисипативної взаємодії між двома домішками, чим зазвичай і обмежуються в подібних розглядах [45]. Проте, як відомо, наприклад, в оптиці, при розсіянні електромагнітного поля на сукупності розсіювачів можуть виникати колективні ефекти, такі як колективне радіаційне тертя чи ефект Дікке, коли розсіяне поле визначається не аддитивною сумою розсіювачів, а пропорційна їх квадрату. Крім того, розсіяння визначається квадратом флуктуації кількості частинок в кореляційному об'ємі, так що для регулярного розподілу розсіювачів колективний ефект і саме розсіяння пригнічується, див. наприклад [99,100]. Ще однією властивістю розсіяння на неоднорідних розподілах розсіювачів є гігантські флуктуації локального електромагнітного поля, як це спостерігається для фрактальных кластерів наночастинок [101].

Тут ми покажемо, що аналогічний колективний ефект може виникати при розсіянні потоку газу на кластері домішок, причому цей колективний ефект виникає не за рахунок синхронізації фаз, як для розсіювачів в оптиці, а за рахунок колективного нелінійного ефекту блокади. З іншого боку, розсіяння в нашому випадку також визначається квадратом флуктуації кількості частинок у вибраному елементі об'єму, в той час як для однорідного розподілу розсіювачів колективний ефект не проявляється.

Зокрема, в цьому розділі буде показано, що при наявності нелінійних колективних ефектів, типу ефекту блокади, розсіяння потоку газу 1) суттєво підсилюється при гетерогенній фрагментації цільного включення на кластер домішок; 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; 3) наявність великих флуктуацій розсіяного поля густини газу всередині нерегулярних кластерів домішок; 4) в неадіабатичному режимі, показано, що формування збурення газу з профілем типу доменної стінки зумовлено ефектом зупинки ударної хвилі; також показано наявність генерації кластером солітоноподібних структур типу лавин або передвісника.

3.2 Підсилення розсіяння при нерегулярному розподілі домішок в кластері

В цьому підрозділі ми стисло, тезисно сформулюємо основні отримані результати для колективного розсіяння потоку газу системою домішок, а в наступних підрозділах дамо їх кількісну характеристику. Ключові результати наочно представлені на Рис. 3.1. Рисунки *а*–*д* демонструють нерівноважні стаціонарні[1] розподіли $\langle n(\mathbf{r}_i)\rangle$, сформовані при розсіянні потоку частинок газу на сукупностях точкових домішок, організованих в просторово обмежені (круглі) «кластери» різного типу: *а* — компактний кластер (суцільне непроникне безструктурне включення), *б* та *в* — невпорядковані кластери (неоднорідно фрагментовані включення) різної щільності, *г* — регулярний кластер (впорядкований розподіл домішок в кластері). Всі перелічені кластери складаються з однакової кількості частинок N. Крім таких «дискретних» кластерів, для порівняння приведено ще один випадок *д* — «однорідний» кластер, коли замість точкових домішок, кластер описує

[1] В числових розрахунках вважалось, що стаціонарний стан встановився, якщо зміни розподілу середньої концентрації $n(\mathbf{r}, t)$ за одиницю часу ставали нехтовно малими при $t \to \infty$.

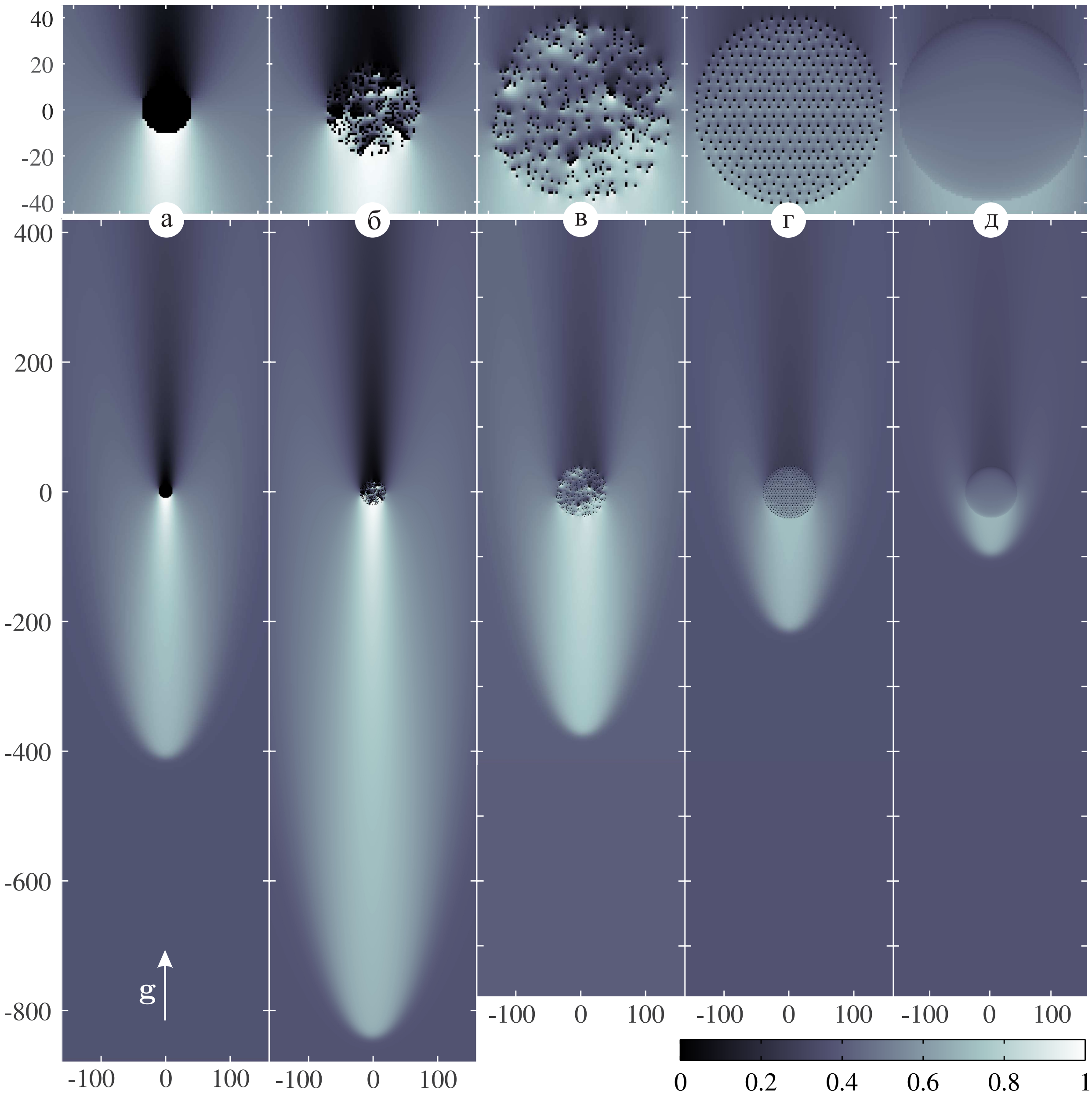


Рис. 3.1. Стаціонарні розподіли середніх чисел заповнення $\langle n(x_i, y_i)\rangle$. Вгорі приведено збільшені зображення внутрішньої структури для кожного кластера: (а) суцільний (непроникний) кластер, (б) та (в) невпорядковані кластери, (г) регулярний (впорядкований) кластер, (д) однорідний кластер. $R = 10.8\ell$ для (а), $R = 20\ell$ для (б), $R = 40\ell$ для (в)–(д). Для всіх приведених розподілів: кількість домішок, що формують кластер, однакова — $N = 362$, $n_0 = 0.37$, $|\mathbf{g}| = 0.5$ (потік направлено вздовж OX).

однорідний розподіл $\langle u(\mathbf{r}_i)\rangle = \bar{u} = \text{const}$, де середня (ефективна) щільність кластера $\bar{u}$ задана рівною щільності ϕ кластерів *в* та *г*. Загальна картина розсіяного поля $\delta n(\mathbf{r}_i) = \langle n(\mathbf{r}_i)\rangle - n_0$ в кожному з цих випадків демонструє

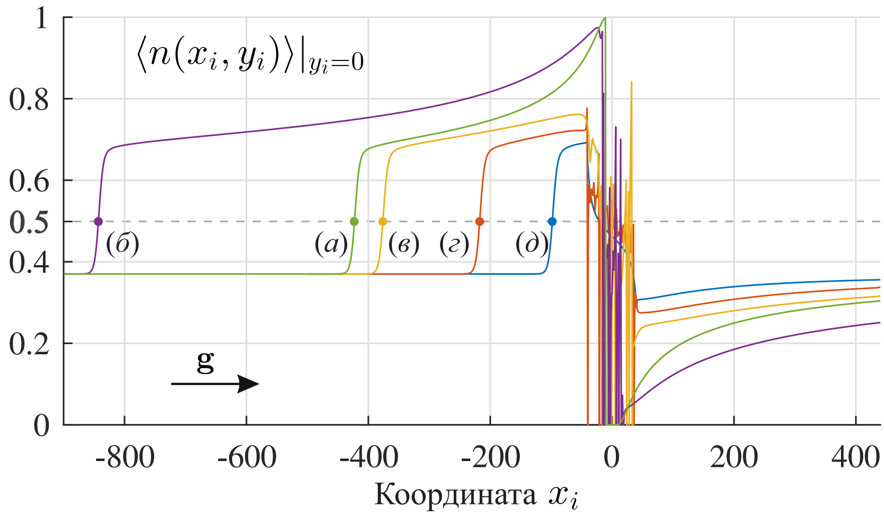


Рис. 3.2. Профілі $\langle n(x_i, y_i)\rangle|_{y_i=0}$ розподілу концентрації газу (середніх чисел заповнення) вздовж OX для відповідних двовимірних розподілів, представлених на Рис. 3.1.

суттєві відмінності вже на якісному рівні. Це дозволяє сформулювати наступні ключові властивості.

1) Фрагментація[2] суцільного включення на сукупність окремих домішок (кластер) може значно підсилювати розсіяння потоку газу. Як видно з Рис. 3.1*б*, для кластера з концентрацією домішок $\phi = N/(\pi R^2) < 1$ область блокади суттєво більша ніж для компактного ($\phi = 1$) кластера на Рис. 3.1*а* (див. відповідні профілі $\langle n(x_i, y_i)\rangle|_{y_i=0}$ на Рис. 3.2). Цей ефект є наслідком колективного ефекту блокади (Розділ 2), який зумовлює екранування потоку газу між домішками. На перший погляд, цей ефект можна було б також пояснити і тим, що фрагментований кластер має більшу ефективну площу ніж компактний і, відповідно, дає більш інтенсивне розсіяння. Таке пояснення дійсно має сенс для кластерів з високою щільністю, $\phi \to 1$, тобто в границі слабо фрагментованого кластера. Проте, як видно з Рис. 3.1*в*, неоднорідний кластер вдвічі більшого радіусу ніж на Рис. 3.1*б* дає значно слабше розсіяння, хоч і має більший ефективний розмір.

2) Суттєве підсилення розсіяння може бути зумовлене неоднорідностя-

[2]Сама динаміка процесу фрагментації включення тут не розглядається, натомість використовується попередньо заданий випадковий розподіл домішок в кластері, що «імітує» фрагментоване включення.

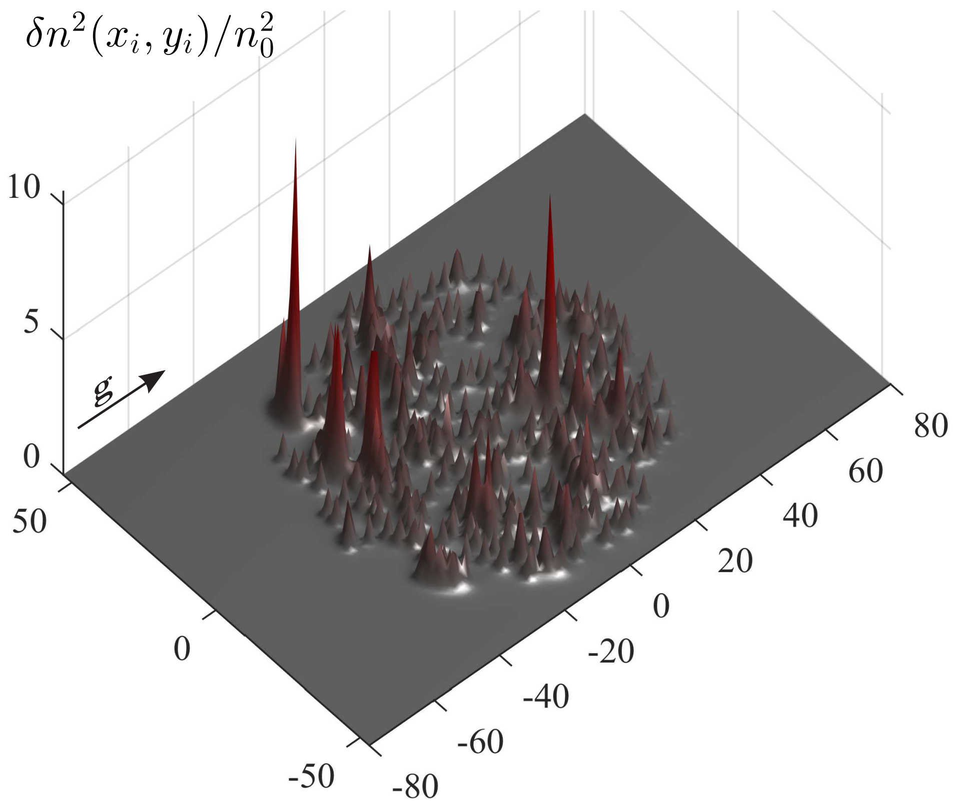


Рис. 3.3. Сильні локальні флуктуації розсіяного поля $\delta n(\mathbf{r})$ всередині випадково неоднорідного кластера домішок. Кластер складають $N = 362$ домішок, випадково розподілених в межах круга з радіусом $R = 45\ell$ (відносна концентрація $\phi = 0.0569$); при цьому виникають локальні скупчення різного розміру та форми. Зовнішнє поле $\mathbf{g}$ направлене вздовж OX, $|\mathbf{g}| = 0.5$, $n_0 = 0.2$.

ми в просторовому розподілі домішок всередині кластера, Рис. 3.1*в*–3.1*г* та 3.2. Цей ефект є аналогічним до розсіяння світла на неоднорідностях в розподілі атомів (дипольних моментів). Як відомо, властивості такого розсіяння визначаються флуктуаціями кількості атомів у визначеному об'ємі або двоточковою кореляційною функцією [99, 100, 102–104]. Як видно з Рис. 3.1*в*–*д*, регулярно впорядкований кластер дає істотно слабше розсіяння.

Зазначимо, що всередині випадково неоднорідного кластера можуть виникати сильні флуктуації розсіяного поля $\delta n(\mathbf{r})$, див. Рис. 3.3, тобто $\delta n^2(\mathbf{r}_i) > n_0^2$. Це означає, що розсіяння потоку газу на такого типу структурах неможливо адекватно описати шляхом введення ефективного ко-

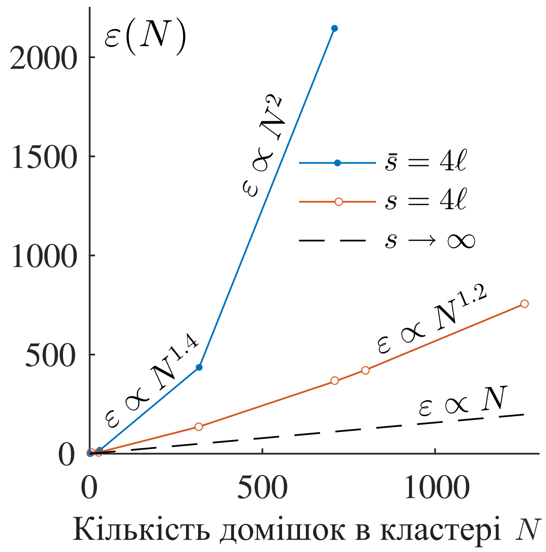


Рис. 3.4. Залежність дисперсії ε від кількості домішок N в кластері. Штрихова лінія відповідає системі N домішок, рознесених у просторі на нескінченність. Суцільна червона лінія — регулярно впорядкований кластер, в якому відстань s між найближчими домішками утримується рівною $s = 4\ell$. Суцільна синя лінія — випадково неоднорідний кластер, для якого середнє по кластеру значення s також рівне $\bar{s} = 4\ell$. Зовнішнє поле $\mathbf{g}$ направлене вздовж OX, $|\mathbf{g}| = 0.5$, $n_0 = 0.2$.

ефіцієнта дифузії для кластера чи параметра глибини проникнення, див. Рис. 3.1*в*–*д*. Окрім цього, наявність таких флуктуацій (великих градієнтів густини) може зумовити сильні локальні флуктуації сил індукованої дисипативної взаємодії між домішками.

Аналогічний ефект сильних локальних флуктуацій розсіяного поля виникає при розсіянні електромагнітного поля на фрактальних кластерах наночастинок (так звані «hot spots», див. [101, 105, 106]).

Для того, щоб кількісно охарактеризувати загальну «амплітуду» розсіяного поля $\delta n(\mathbf{r})$, ми скористаємось величиною на кшталт повної дисперсії збурення густини газу $\varepsilon \equiv \overline{\delta n^2} \propto \int \delta n^2(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r}$. Для кластера з N нескінченно віддалених (незалежних) домішок, тобто коли середній інтервал між ними $\bar{s} \to \infty$, дисперсія є просто $\varepsilon \approx \sum_{i=1}^{N} \overline{\delta n_i^2} \approx N\overline{\delta n_*^2} \propto N$, де $\overline{\delta n_*^2}$ — дисперсія одинокої домішки. Як показано на Рис. 3.4, залежність $\varepsilon(N)$ для кластера може бути степеневою і, зокрема, для випадково неоднорідного кластера поводить себе як $\propto N^2$, а отже, ефект носить явно колективний характер.

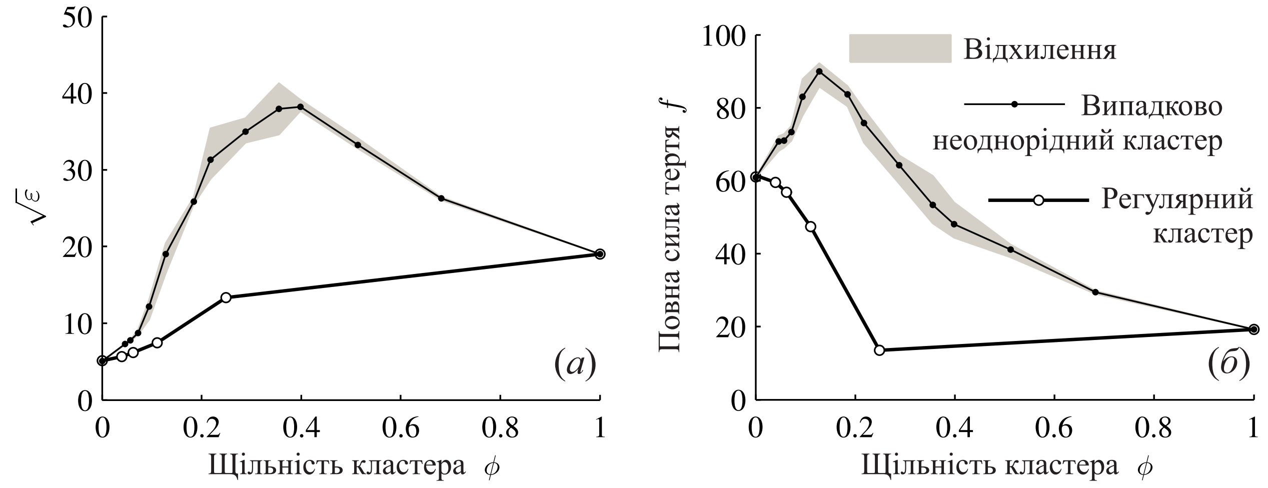


Рис. 3.5. (а) Залежність повної сили тертя $f \equiv |\boldsymbol{f}|$ (в одиницях kT/ℓ) від щільності кластера ϕ. (б) Залежність кореня дисперсії збурення $\sqrt{\varepsilon}$ від щільності кластера ϕ; $R \in (\infty\ 10.8\ell]$, $N = 362$, $|\mathbf{g}| = 0.5$, $n_0 = 0.2$.

Повна сила тертя[3], що діє на кластер домішок теж суттєво залежить як від його щільності ϕ, так і від внутрішньої структури (впорядкування). Як видно з Рис. 3.5*б*, поведінка залежностей для регулярно і нерегулярно впорядкованого кластерів принципово відрізняється. В границі нескінченно віддалених домішок, $\bar{s} \to \infty$ ($\phi \to 0$), їх впорядкування ніяк не проявляється і величина сили прямує до спільного для обох кластерів значення $f(\phi = 0)$. Проте, вже на початковій стадії об'єднання[4] домішок в кластер, тобто при $\phi \lesssim 0.1$, починає проявлятися колективна поведінка, зумовлена далекосяжною індукованою взаємодією між домішками та формуванням колективного збурення газу. Для регулярно впорядкованого кластера спостерігається тенденція до зменшення повної сили на домішки з боку частинок газу (потоку), Рис. 3.5*б*. Навпаки, для випадково неоднорідного

[3]Тут використовується означення сили $\boldsymbol{f} = -\int_S \mathbf{n}(\mathbf{r})\delta n(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r}$, де S — поверхня включення і $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ — зовнішня нормаль до неї в точці $\mathbf{r}$, див. [25, 28, 69]. Для точкових включень (один окупований вузол) використовується дискретизована версія цього виразу, як в роботі [45].

[4]Тут мається на увазі, що (при $N = \mathrm{const}$) зміну аргументу ϕ в залежностях на Рис. 3.5 можна інтерпретувати або як (адіабатичну) фрагментацію включення (якщо «читати» графіки справа-наліво: від $\phi = 1$ до $\phi = 0$), або як злиття незалежних домішок в компактно упакований кластер (зліва-направо).

кластера спостерігається зростання сили, яке припиняється з формуванням перед хмарою домішок спільної області блокади. Остання екранує кластер домішок як ціле від потоку газу тим самим зменшуючи повну силу $\boldsymbol{f}$. Іншими словами, характерний пік функції $\boldsymbol{f}(\phi)$ відображає перехід від режиму, коли потік газу «взаємодіє» з хмарою домішок як з цілим (що супроводжується формуванням спільної області блокади), до іншого режиму, коли потік «розрізняє» в хмарі домішок дискретні центри розсіювання. Також зауважимо, що для неоднорідно впорядкованого кластера, в усьому інтервалі значень $[0\ 1)$ його відносної концентрації ϕ, величина сили є більшою ніж її значення $f(\phi = 1)$ в границі щільноупакованого кластера.

Після пікового значення сили, при подальшому ущільненні кластера, спостерігається її монотонне спадання до значення $f(\phi = 1)$. Цей процес можна пояснити, по-перше, зменшенням ефективного розміру кластера, по-друге, ослабленням флуктуацій в розподілі домішок при їх зближенні і остаточному формуванні компактного кластера. Попри це, одночасно зі зменшенням сили, залежність величини $\sqrt{\varepsilon}$ від ϕ демонструє характерний пік, який відсутній для регулярно впорядкованого кластера, що показано на Рис. 3.5*a*. Це посилення дисперсії свідчить про ріст області блокади, однак на такій величині як сила f це суттєво не відображається. Пік дисперсії відповідає тим значенням щільності кластера при яких найбільш виражено проявляється колективне формування спільного збурення (області блокади та сліду розрідження).

Таким чином, колективне розсіяння газу доповнене нелінійним ефектом блокади демонструє якісно відмінну поведінку, що істотно залежить від характеру просторового розподілу домішок в кластері.

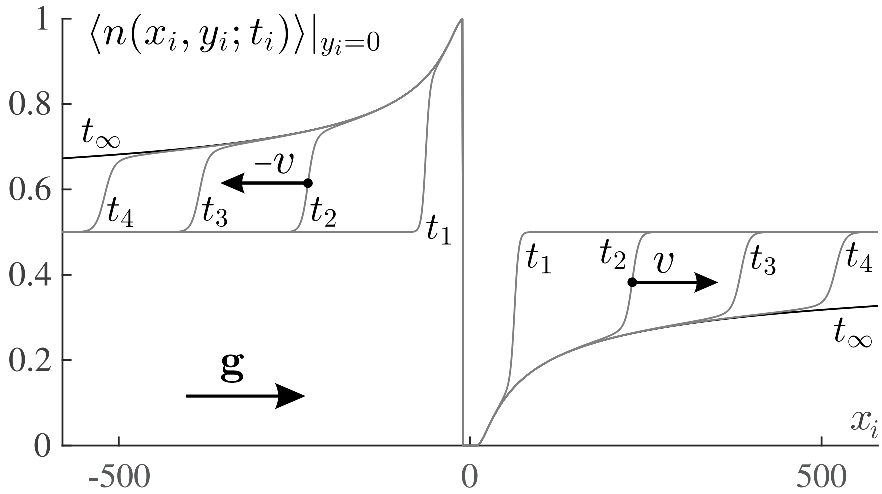


Рис. 3.6. Профілі збурення $\langle n(x_i, y_i)\rangle|_{y_i=0}$ навколо суцільного непроникного круглого включення з радіусом $R = 10.8\ell$ в послідовні моменти часу $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$ при відносній концентрації газу $n_0 = 0.5$ та $|\mathbf{g}| = 0.5$. Профіль при $\nu t_\infty = 5 \times 10^4$ відповідає стаціонарному розподілу, що встановився на великих часах.

3.3 Ефекти зупинки та підсилення ударної хвилі

Нерівноважний стаціонарний розподіл густини газу, який формується при розсіянні потоку на домішках, можна розглядати як залишкове збурення густини, що встановилось після тривалої еволюції системи в часі. Проте властивості системи та її поведінка протягом переходу в стаціонарний стан може істотно відрізнятися від того, що спостерігається в самому стаціонарному стані. Наприклад, при різкій активацій потоку рідини (чи раптовому зміщенні домішки), формування збурення навколо домішок може супроводжуватися утворенням і поширенням ударних хвиль, зміною знаку кореляційної функції чи дисипативної сили між домішками [39–41, 67].

Розглянемо динаміку системи в часі, що передує формуванню стаціонарного розподілу. При раптовому «ввімкненні» зовнішнього поля, яке створює потік, може відбуватись формування і поширення одразу двох протилежно направлених (за потоком і проти) ударних хвиль з кінковим профілем. Для випадку суцільного включення (компактний кластер) еволюція таких ударних хвиль показана на Рис. 3.6 і 3.7. Аналогічна поведінка характерна також і для кластерів (наприклад, тих, що зображені на Рис. 3.1*а*–*д*), звичайно, якщо вони досить великі ($R \gg \ell$) і достатньо щільні для того, щоб викликати колективне формування нелінійного збурення. Останнє, в свою чергу, можливе при достатньо сильному зовнішньому полі $\mathbf{g}$ (іншими словами, коли потік достатньо «швидкий») і при достатній концентрації газу n_0 (зрозуміло, що при $n_0 \to 0$ або $n_0 \to 1$ ударні хвилі зникатимуть). Ударна хвиля типу *хвилі стискання*, що рухається назустріч потоку, відображає динаміку росту щільної області, прилеглої до поверхні включення (або ефективної поверхні кластера). Ударна хвиля в напрямку за потоком (типу *хвилі розріджування*) відповідає за формування хвоста розрідження чи каверни (іншими словами, область локалізації вакансій). Таким чином, рельєф стаціонарного розподілу густини можна розглядати як залишкове збурення після розсіяння потоку на домішках (режим стаціонарного розсіяння при $t \to \infty$), а точніше, після проходження ударних хвиль. Динаміка двох ударних хвиль, в загальному випадку, може відрізнятися, проте задовольняє властивості інверсії при переході з інтервалу концентрацій $n_0 < 0.5$ до $n_0 > 0.5$. Ці особливості будуть розглянуті далі.

Сам факт утворення ударних хвиль для поля n є очікуваним, тому що в континуальному ліміті (в довгохвильовому наближенні) ґратковий газ з жорсткокоровою взаємодією і зовнішнім рушійним полем описується [49, 50, 68, 69] рівнянням дифузії з нелінійним дрейфовим доданком:

$$\partial_\tau n = \nabla^2 n - \boldsymbol{\nabla}(u\boldsymbol{\nabla} n - n\boldsymbol{\nabla} u) - (\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\nabla})[n(1-u-n)], \tag{3.1}$$

яке являє собою варіант узагальненого рівняння Бюрґерса. Для прикладу, у випадку однокомпонентного ґраткового газу (коли $u \equiv 0$), рівняння (3.1) зводиться до стандартного рівняння Бюрґерса, $\partial_\tau n = \nabla^2 n - (\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\nabla})[n(1-n)]$, яке допускає автомодельний розв'язок у вигляді кінкової ударної хвилі. В одновимірному випадку такий розв'язок матиме вигляд

$$n(x,t) = n_0 - \Delta n \tanh\{g\Delta n[x + vt - x_0]\}, \tag{3.2}$$

і являє собою кінк, що прямує до значень $n_{-\infty} \equiv n(x \to -\infty)$ і $n_\infty \equiv n(x \to \infty)$. Даний розв'язок має місце за неоднорідних межових умов, $n_\infty \neq n_{-\infty}$. Тут, половинна висота кінку $\Delta n = |n_{-\infty} - n_\infty|/2$, а швидкість ударної хвилі v можна виразити у вигляді

$$v = 2g\left(1/2 - n_f\right), \tag{3.3}$$

$n_f = (n_{-\infty} + n_\infty)/2$ відповідає значенню густини $n(x_f)$ в місці знаходження фронту x_f.

У двовимірному випадку, для концентраційного профілю $\langle n(x_i, y_i)\rangle|_{y_i=0}$ вздовж OX, роль неоднорідних межових умов відіграє різниця концентрацій поблизу кластера чи включення і на великих відстанях від нього. На початковому етапі еволюції профілю потік газу індукує збурення густини в приповерхневій області, $n(\mp R, y = 0) \gtrless n(\mp\infty, y = 0) \equiv n_0$. По аналогії з поведінкою ударної хвилі в одновимірному випадку, її швидкість (3.3) може бути направлена як протилежно $\mathbf{g}$ (у випадку $n_f > 0.5$) так і вздовж ($n_f < 0.5$), що узгоджується з еволюцією профілю двовимірної ударної хвилі на Рис. 3.6 і 3.7.

Розглянемо процес формування щільної компактної області перед непроникним круглим включенням (компактним кластером) при $n_0 < 0.5$. Проаналізуємо поведінку профілю $\langle n(x_i, y_i)\rangle|_{y_i=0}$, який відповідає центральній області ударної хвилі. Положення фронту ударної хвилі x_f означимо як точку перегину кінкового профілю $\langle n(x_i, y_i)\rangle|_{y_i=0}$. Як показано на Рис. 3.7, ударна хвиля зупиняється на певній відстані x_f^* від включення, причому, зупинка ($v_f \to 0$) відбувається тоді, коли $n_f = n(x_f, 0) \to 0.5$.

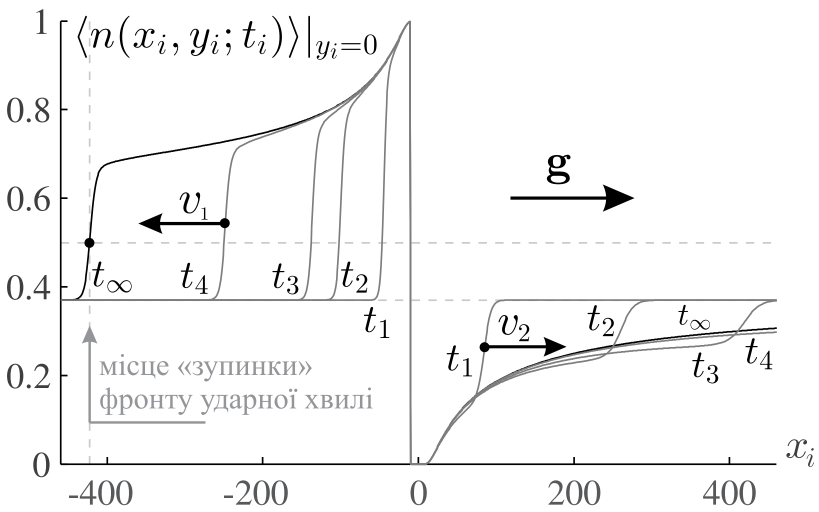


Рис. 3.7. *Зупинка ударної хвилі.* Профілі збурення $\langle n(x_i, y_i)\rangle|_{y_i=0}$ навколо суцільного непроникного круглого включення з радіусом $R = 10.8\ell$ в послідовні моменти часу $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$ при відносній концентрації газу $n_0 = 0.37$ та $|\mathbf{g}| = 0.5$. Профіль при $\nu t_\infty = 5 \times 10^4$ відповідає стаціонарному розподілу, що встановився на великих часах (для $n_0 = 0.37$ такий двовимірний розподіл густини приведено на Рис. 3.1*a*).

Такий критерій зупинки виконується також і для кластерів різної структури, див. Рис. 3.1. Швидкість фронту ударної хвилі асимптотично згасає як $v_f(t) \propto e^{-\gamma t}$. Для ударної хвилі, яка поширюється за потоком, швидкість фронту згасає згідно степеневого закону і без ефекту зупинки, при цьому формується збіднений слід позаду включення. Для ударної хвилі попереду включення, в інтервалі $n_0 > 0.5$ ефект зупинки зникає, але спостерігається для хвилі позаду включення. Це узгоджується з ефектом перемикання, розглянутим в пункті 1.2. В окремому випадку $n_0 = 0.5$, обидві ударні хвилі рухаються без зупинки і асимптотично загасають як $n_f \propto 1/2 \pm At^{-\beta}$, Рис. 3.6.

Таким чином, критерій зупинки ударної хвилі, який випливає з виразу (3.3), досить точно виконується і в двовимірному випадку для концентраційного профілю вздовж OX. Дійсно, ріст області блокади (рух фронту ударної хвилі) має місце в умовах коли наплив частинок газу домінує над відпливом зумовленим латеральною дифузією частинок. В такому випадку можна припустити, що для досить великого і щільного кластера, динаміка нагромадження частинок в центральній області ударної хвилі (профіль при $y = 0$) може бути наближено описана квазіодновимірним рівнянням. При $n_f \to 0.5$ рух фронту припиняється, тобто $v_f \to 0$. Ця умова є кількісним критерієм зупинки, що узгоджується з результатами числових розрахунків для центрального профілю ударної хвилі у двовимірному випадку, Рис. 3.7 та 3.2. Квазіодновимірний випадок дозволяє лише оцінити умову зупинки і, звісно, не може дати повного опису двовимірної ударної хвилі, її латеральної області та асимптотичної поведінки.

Тепер розглянемо ефекти, спричинені нерегулярністю в розподілі домішок. Перша особливість полягає в тому, що розпад твердого включення або однорідного кластера на неоднорідний кластер призводить до підсилення ударної хвилі — зростання її амплітуди та швидкості руху її фронту, див. Рис. 3.8 та відповідні стаціонарні профілі на Рис. 3.1. Іншу властивість можна назвати ефектом лавини, вона розглянута далі в підпункті 3.3.1.

На початковій стадії, відразу після різкого ввімкнення зовнішнього поля, кластер домішок спроможний згенерувати більше збурення густини (як

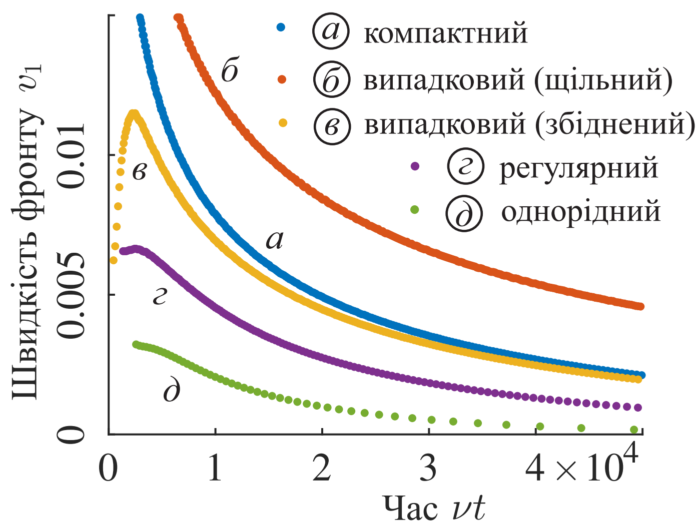


Рис. 3.8. Часова залежність швидкості v_1 [в одиницях $\ell/(\nu t)$] руху фронтальної ударної хвилі для кластерів з Рис. 3.1*а*–*д*, відповідні криві позначено *а*–*д* так само як на Рис. 3.1.

всередині самого кластера так і навколо нього) ніж те, яке зберігається в стаціонарному стані. По цій причині, система демонструє тенденцію в подальшому позбутися надлишкового збурення густини, що може бути реалізовано наступним чином.

Для в міру щільних кластерів, надлишкове збурення релаксує через тимчасове прискорення ударної хвилі на початкових часах. Це можна пояснити, розглянувши динаміку поведінки для декількох реалізацій випадково неоднорідного кластера з деяким середнім значенням щільності $\phi \approx 10^{-1}$, див. Рис. 3.9. Як видно з Рис. 3.9*а*, прискорення швидкості руху фронту ударної хвилі чутливе до реалізацій випадково неоднорідного кластера. Цьому тимчасовому прискоренню завжди передує (або супроводжує його) пік підсилення повної сили на кластер, в той час як для реалізацій, при яких ефект прискорення не спостерігається, повна сила демонструє монотонний вихід на насичення. Тимчасове (пікове) підсилення величини повної сили свідчить про нагромадження надлишкового збурення (всередині кластера) з його наступним «трансфером» в прискорення ударної хвилі. При раптовій активації потоку, нелінійний ефект блокади спричиняє локальне насичення скалярного поля густини $n(\mathbf{r}, t)$, яке досягається швидше, ніж повне збурення встигає перерозподілитися в кластері таким чином, щоб мінімізувати повну силу, що діє на нього. Це призводить до прискореного росту області блокади на початкових часах.

Зауважимо, що підсилення ударної хвилі, певною мірою корелює з результатами добре відомої проблеми про взаємодію повітряної ударної хвилі з пористим екраном, див. [107, 108], де спостерігався ефект тимчасового підсилення відбитої ударної хвилі. Також важливо відзначити, що розподіл збурення всередині кластера для реалізації 2 на Рис. 3.9*б* демонструє наявність характерних досить великих зон стагнації (темного кольору), де слабо проявляються збурення газу і які формують ефективний розмір кластера, див. Рис. 3.10, детермінуючи «глибину проникнення» потоку в кластер.

Зазначимо, що поведінка системи також є чутливою до змінних потоку газу: концентрації n_0 та величини зовнішньої порушної сили $\mathbf{G}$. 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; деталі цих параметричних залежностей наведені в Додатку Б.

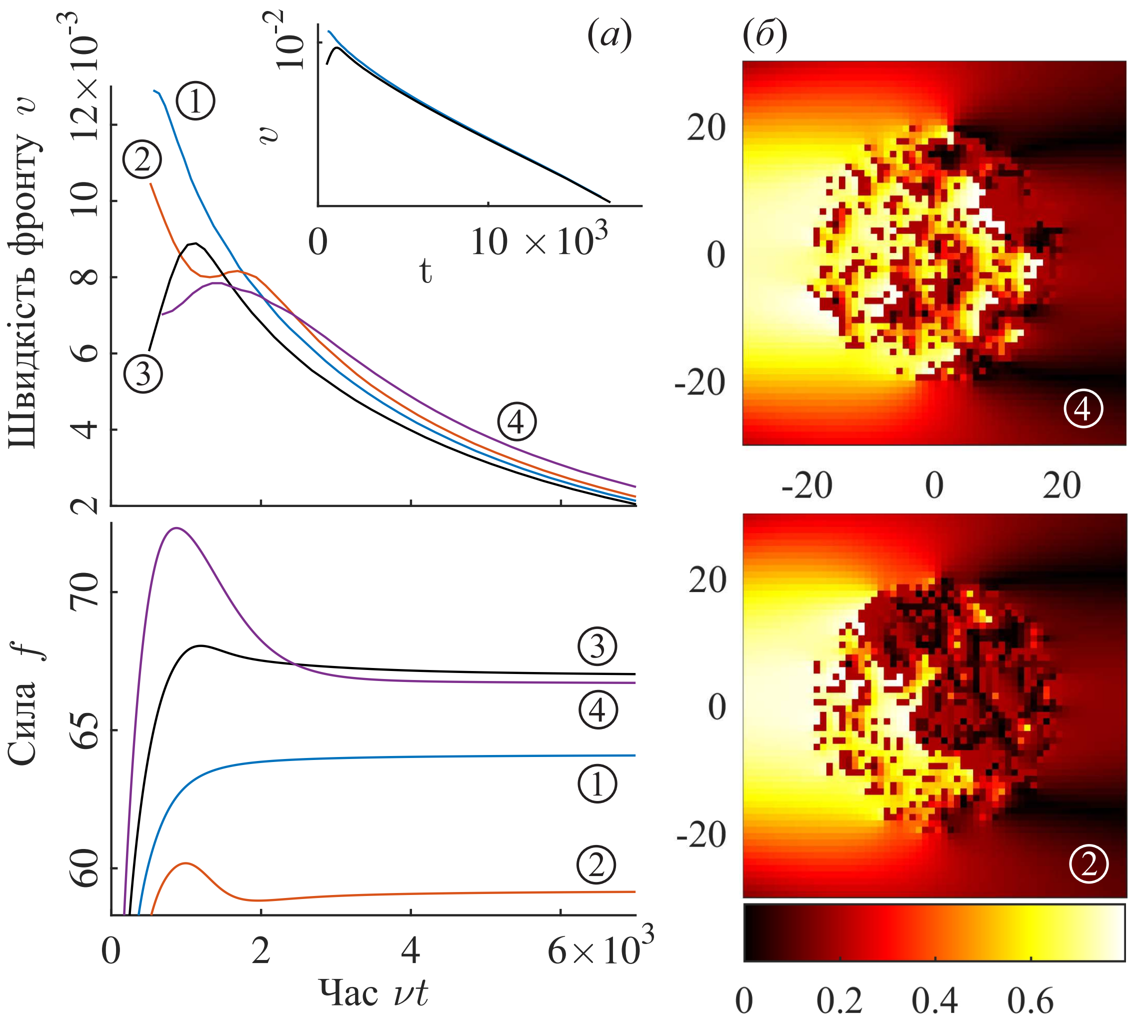


Рис. 3.9. *а*) Часова залежність швидкості руху фронту ударної хвилі та повної сили для кількох реалізацій (позначених 1–4) випадково неоднорідного кластера домішок. $N = 362$, $R = 20\ell$, $|\mathbf{g}| = 0.5$, $n_0 = 0.2$, f та v_1 наведено в одиницях kT/l та $\ell/(\nu t)$, відповідно. Сповільнення швидкості фронту відбувається приблизно експоненційно, $\ln v_1 \propto -t$, див. внутрішній графік на рисунку *а*). *б*) Стаціонарні розподіли $\delta n^2(x_i, y_i)$, реалізації 4 і 2.

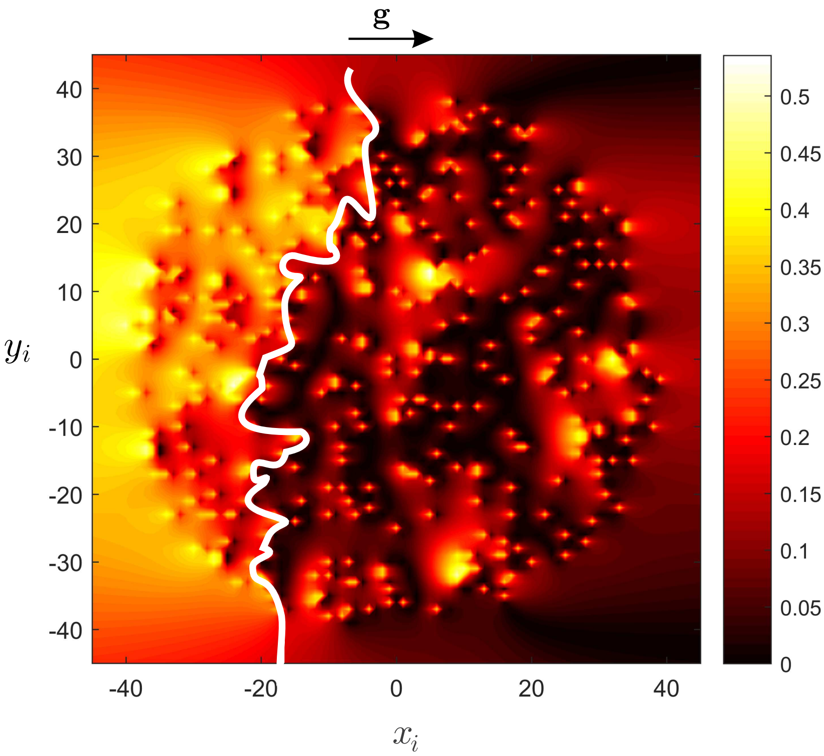


Рис. 3.10. Стаціонарний розподіл $\delta n^2(x_i, y_i)$ для ще одної реалізації випадково неоднорідного кластера, де біла лінія приблизно відмежовує темні зони стагнації від відносно світлої області, яка характеризує умовну глибину проникнення потоку газу. Всі параметри системи такі ж як на Рис. 3.9.

3.3.1 Ефект лавини (передвісника)

Надлишкове збурення густини «вивільняється» з кластера у вигляді одинокої біжучої хвилі, що просувається за потоком при $n_0 < 0.5$, Рис. 3.11(а), чи назустріч потоку при $n_0 > 0.5$, Рис. 3.11(б) or 3.11(в). Таке «перемикання направлености» в залежності від концентрації газу узгоджується з ефектом інверсії сліду ([68] та Розділ 1). Характерний розмір такого згустку частинок газу (або вакансій), що відокремився від кластера, або напівширина асоційованого з ним горба (ями) профілю, має приблизно таку ж величину як і лінійний розмір самого кластера $2R$. Такий механізм має місце у випадку не дуже щільних кластерів, $\phi \ll 1$, для яких спільна область блокади перед розсіювачами (домішками) або взагалі не формується, або ж проявляється слабо.

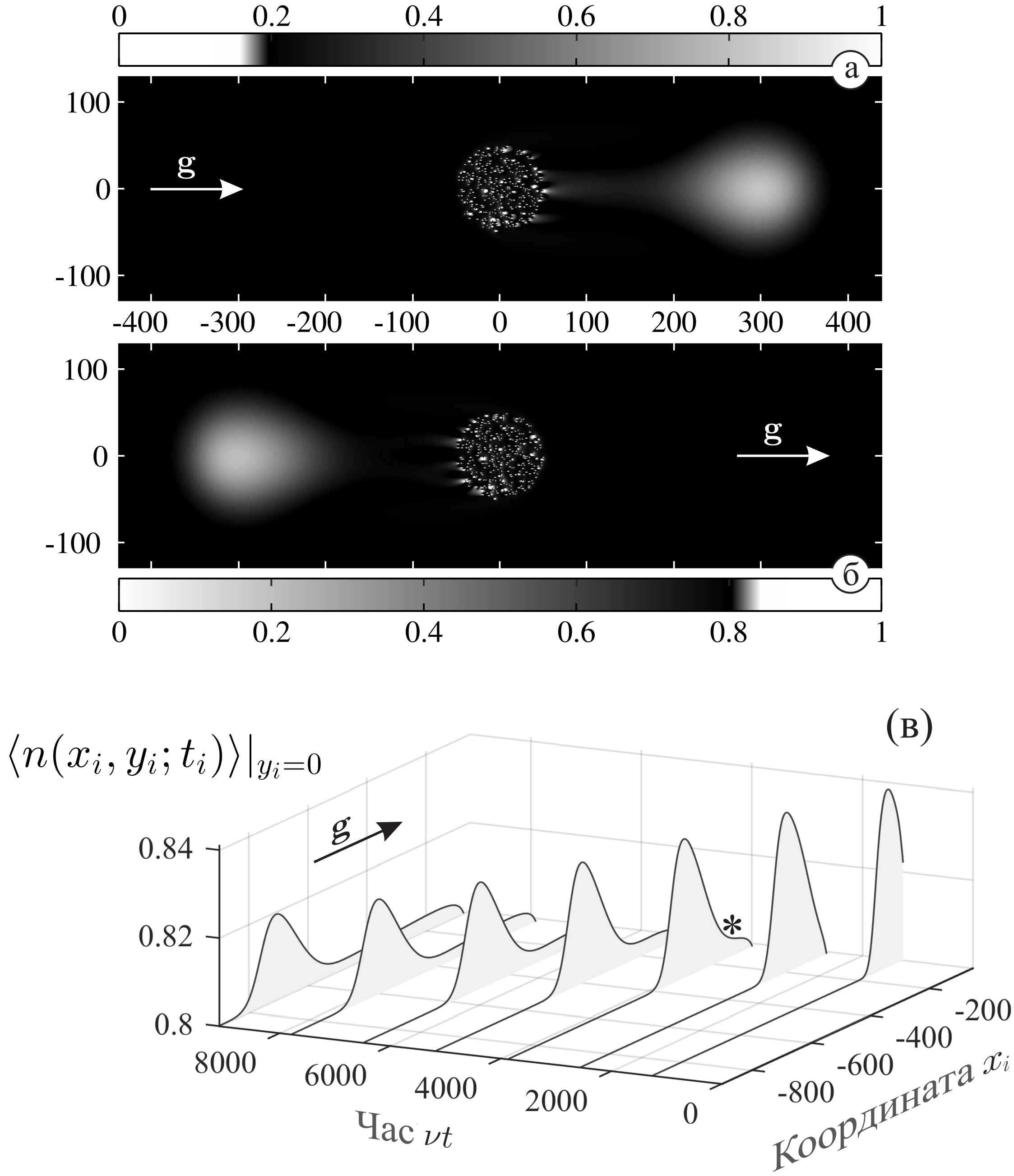


Рис. 3.11. Миттєві розподіли концентрації газу $|\delta n(x_i, y_i)|$ в момент часу $\nu t = 3.9 \times 10^3$ ілюструють рух солітоноподібних структур: згусток частинок газу (б) або вакансій (а), що відділяється від кластера. На панелі (в) показано еволюцію в часі профілю густини $\delta n(x, t; y = 0)$, що відповідає «солітону» у вигляді горба, який рухається на зустріч потоку частинок газу. Профіль позначений зірочкою відповідає розподілу, приведеному 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), зовнішнє рушійне поле $\mathbf{g}$ направлено вздовж OX, $|\mathbf{g}| = 0.5$.

Зазначимо, що така поведінка нагадує відому задачу самоорганізованої критичності про формування каскадової лавини в моделі купи піску, див. [109]. Натомість, в нашій ситуації, спостерігається лише поодиноке лавиноподібне «сходження», що може бути зумовлено використанням наближення середнього поля та нехтуванням флуктуаціями в газі.

3.4 Висновки

В даному розділі представлено низку результатів, що стосуються ефектів колективного розсіяння потоку газу на скінченнорозмірних кластерах домішок та пов'язаної з цим генерації ударних хвиль, за присутності нелінійного ефекту блокади. На основі числових розв'язків кінетичного рівняння для локальних середніх чисел заповнення ґраткового газу, відображено значну роль безладу в просторовому розподілі розсіювачів (домішок). Результати показують, що розсіяння потоку газу на хмарі домішок та генерація ударної хвилі суттєво підсилюється при розпаді цільного включення на фрагменти чи на розріджений кластер окремих домішок. Таке підсилення більш ефективне для випадково неоднорідних кластерів, порівняно з регулярно впорядкованими. Крім цього, випадковий кластер розсіювачів характеризується сильними локальними флуктуаціями розсіяного поля всередині кластера та «лавинним» ефектом при раптовій появі зовнішньої порушної сили. Показані ефекти виявляють близьку формальну аналогію з класичною задачею розсіяння світла на атомних, молекулярних чи наночастинкових ансамблях. Основні результати розділу опубліковані в праці [70].

РОЗДІЛ 4
ІНДУКОВАНІ ДОВГОЧАСНІ ВІД'ЄМНІ КОРЕЛЯЦІЇ. «ВІД'ЄМНИЙ» ДИФУЗІЙНИЙ ТРАНСПОРТ ТА СУБДИФУЗІЯ В НЕОДНОРІДНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

В попередніх розділах основну увагу ми приділяли нелінійним ефектам, пов'язаним з ефектом блокади, за який відповідає нелінійний дрейфовий доданок, який у довгохвильовому наближенні, для рівняння (1.3), має вигляд $(\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\nabla})[n(1-u-n)]$. В цьому розділі ми розглянемо роль іншого, не менш важливого, доданку $\boldsymbol{\nabla}(u\boldsymbol{\nabla}n - n\boldsymbol{\nabla}u)$ який пов'язаний з розрізнюваністю частинок різних сортів і відповідає за ефекти захоплення одної компоненти іншою або за ефекти змішування компонент. Зокрема, як ми покажемо, цей доданок може відповідати за появу локальної в часі нестійкості, або ефекту від'ємного масоперенесення.

Ключовою властивістю є те, що у випадку багатокомпонентного ґраткового газу, тобто коли в ньому розрізняються хоча б два сорти частинок, в системі виникають додаткові кореляції. Ці додаткові кореляції викликані лише розрізнюваністю частинок і можуть виникати навіть за відсутності будь-яких прямих взаємодій між частинками в системі, причому розрізняти частинки достатньо просто за кольором. При переході до макроскопічного опису ґраткового газу, розрізнюваність частинок призводить до появи додаткового нелінійного потоку, який відповідає за змішування частинок різних сортів. Тобто, поруч зі звичайною дифузією відбувається дифузія кольорів, їх змішування. Єдиною умовою для виникнення цього додаткового нелінійного потоку є обмеження виключеного об'єму в ґратковому газі, яке означає, що кожен окремий вузол ґратки не може бути окупований більш як одною частинкою (це обмеження звично асоціюють з жорсткоровою взаємодією).

Цей нелінійний потік в рівняннях призводить до цілого ряду ефектів аномального транспорту. Найбільш виражено ці ефекти проявляються у випадку, якщо рухливості ν компонент відмінні. Тут можна виділити два граничних випадки і обидва вони відповідають адіабатичному наближенню. Якщо спрямувати рухливість однієї з двох компонент системи (наприклад, u і n) до нуля, $0 \leftarrow \nu_u \ll \nu_n$, отримаємо модель масоперенесення в неоднорідному середовищі. Інший граничний випадок відповідає умові, коли рухливість одної з компонент спрямована до нескінченності, $\nu_u \ll \nu_n \to \infty$, тобто компонента u набагато «швидша» і може виступати в ролі «носія взаємодії» для повільної підсистеми і, як наслідок, може призводити до появи додаткових кореляцій, індукованих швидкою підсистемою у повільній підсистемі. Ці два граничних випадки розглянуті в двох наступних пунктах цього розділу, 4.1 та 4.2.

4.1 Індуковані довгочасні кореляції в двокомпонентному ґратковому газі

Опосередковані частинками середовища *непрямі кореляції* між двома трейсерами, при їх русі через невзаємодіючий (але з обмеженням виключеного об'єму) ґратковий газ, було продемонстровано в роботі [45]. Рух трейсера супроводжується збуренням густини частинок газу навколо нього [21], яке можна умовно розглядати як «поляризаційну шубу» густини навколо трейсера. Ефективне притягання між такими квазічастинками може призводити до їх спарювання, супроводжуваного організацією спільної «шуби» навколо двох трейсерів, див. [45].

Такі непрямі кореляції подібні до гідродинамічних взаємодій між колоїдними частинками [110–112]. Один з цікавих ефектів що спостерігається в таких колоїдних суспензіях — це наявність довгочасних кореляцій між частинками в заповненому рідиною квазіодновимірному каналі, коли кореляційна функція швидкостей для пари частинок характеризується довгочасним від'ємним хвостом [39–41, 113].

В цьому пункті нашою метою буде показати можливість аналогічних довгочасних кореляцій для «повільної» підсистеми ґраткового газу. З цією метою ми розглянемо найпростіший випадок двокомпонентного ґраткового газу та скористаємось адіабатним наближенням та наближенням однорідного кластера.

У випадку двох компонент макроскопічні рівняння мають вигляд [50,62]

$$\nu_u^{-1}\dot{u} = \nabla^2 u + \boldsymbol{\nabla}(u\boldsymbol{\nabla}n - n\boldsymbol{\nabla}u) + \delta J_u, \tag{4.1а}$$

$$\nu_n^{-1}\dot{n} = \nabla^2 n - \boldsymbol{\nabla}(u\boldsymbol{\nabla}n - n\boldsymbol{\nabla}u) + \delta J_n. \tag{4.1б}$$

При значній різниці рухливостей компонент, $\nu_n/\nu_u \ll 1$, в повільній підсистемі n повинні виникати непрямі кореляції індуковані швидкою компонентою, яка відіграє роль «носія взаємодії».

Для того щоб показати наявність довгочасних кореляцій у важкій (повільній) підсистемі, ми зробимо певні спрощення початкової задачі. Припускаючи що характерний час флуктуацій τ_η задовольняє умові $\nu_u \gg \tau_\eta^{-1} \gg \nu_n$, ми нехтуємо швидкими процесами в легкій підсистемі і обмежуємось адіабатним наближенням, $\nu_u \to \infty$, коли розподіл густини швидкої компоненти адіабатно супроводжує миттєві розподіли повільної компоненти. В рамках такого наближення, джерело флуктуацій δJ_n зберігається лише для повільної компоненти n, рівняння (4.1б).

Щоб конкретизувати вигляд доданку δJ_n ми припустимо, що флуктуації кількості стрибків частинок δJ_{ij}^n зумовлені певним зовнішнім випадковим полем яке створює флуктуації частоти стрибків частинок, $\nu_{i,j}^n(t) = \nu_n + \eta_{i,j}(t)$. Далі, ми зосередимось на великомасштабних флуктуаціях, припустивши, що характерний просторовий масштаб ξ поля η є значно більшим ніж масштаб l неоднорідностей повільної компоненти, $\xi \gg l \gg a$. Тоді, в довгохвильовому наближенні, δJ_n набуває форми дрейфового доданку, що флуктуює $\delta J_n \sim \eta(r,t)\boldsymbol{\nabla} n(1-n-u) \approx \eta(r,t)\boldsymbol{\nabla} n$. В рамках цих наближень кінетичні рівняння набувають вигляду

$$0 = \nabla^2 u + \boldsymbol{\nabla}(u\boldsymbol{\nabla} n - n\boldsymbol{\nabla} u), \tag{4.2а}$$

$$\nu_n^{-1}\dot{n} = \nabla^2 n - \boldsymbol{\nabla}(u\boldsymbol{\nabla} n - n\boldsymbol{\nabla} u) + \nu_n^{-1}\eta(\mathbf{r},\tau)\boldsymbol{\nabla} n. \tag{4.2б}$$

«Легка» компонента $u(r,t)$ залежить від «повільного» часу t як від параметра. Як і в роботі [39], ми будемо розглядати квазіодновимірну ситуацію, коли міжчастинкові кореляції стають найбільш суттєвими. В цьому випадку можна легко виключити швидку змінну u з рівнянь (4.2), див. [49], і отримати самоузгоджене рівняння для повільної компоненти n

$$\frac{\partial n(x,\tau)}{\partial \tau} = \left(1 - u_1 + J(\tau)\int\limits_{-L}^{x} \frac{\mathrm{d}s}{[1-n(s,\tau)]^2}\right)\frac{\partial^2 n(x,\tau)}{\partial x^2} + \nu_n^{-1}\eta(x,\tau)\frac{\partial n(x,\tau)}{\partial x}, \tag{4.3}$$

$$J(\tau) = -(u_2 - u_1)\left(\int\limits_{-L}^{L} \frac{\mathrm{d}s}{[1-n(s,\tau)]^2}\right)^{-1}. \tag{4.4}$$

Тут ми ввели безрозмірний час $\tau = \nu_n t$. Величина $J(\tau)$ описує середній макроскопічний потік «легкої» компоненти $u(x,\tau)$, який проходить через систему [49]; $u(-L,\tau) = u_1 = \mathrm{const}$, $u(L,\tau) = u_2 = \mathrm{const}$, а $n(-L,\tau) = n(L,\tau) = 0$ — це значення середніх чисел заповнення u та n на межах системи $x = \mp L$.

З рівняння (4.3) легко бачити, що кореляції в повільній підсистемі виникають лише в нерівноважному випадку — з ненульовим потоком $J(\tau)$, який відповідає за нелінійний і нелокальний характер дифузійного процесу.

Далі, ми скористаємось наближенням однорідного кластера, яке часто застосовують, наприклад, при описі кулонівського вибуху дейтерієвих кластерів [114, 115]. В такому наближенні розподіл густини $n(x,\tau)$ є системою однорідних одновимірних кластерів. Це виправдано, якщо розмір кластера є значно меншим розміру всієї системи. Кожен такий кластер можна характеризувати його «центром мас» $r_k(\tau)$ та шириною $R_k(\tau)$, так що розподіл повільної компоненти можна представити у вигляді

$$n(x,\tau) = \begin{cases} n_k(\tau) = Q_k/R_k(\tau) & \text{if } |x - r_k(\tau)| \leqslant R_k(\tau)/2, \\ 0 & \text{if } |x - r_k(\tau)| > R_k(\tau)/2, \end{cases} \tag{4.5}$$

де Q_k — це кількість частинок, що містяться в k-му кластері. В подальшому, ми будемо вважати характерний просторовий масштаб ξ флуктуацій $\eta(x,\tau)$ значно більшим типового розміру кластерів, але меншим ніж відстань між ними, $R_k \ll \xi \ll |r_{k+1} - r_k|$. Тоді, вираховуючи моменти розподілу (4.5) з рівняння (4.3), можна отримати рівняння для $r_k(\tau)$ та $R_k(\tau)$

$$\frac{\partial r_k(\tau)}{\partial \tau} = J(\tau)G[n_k(\tau)] - \nu_n^{-1} u_k(\tau), \tag{4.6а}$$

$$\frac{1}{12}\frac{\partial R_k^2(\tau)}{\partial \tau} = 2D[r_k(\tau)] + J(\tau)\left(\sum_{l<k} Q_l G[n_l(\tau)] - \sum_{l>k} Q_l G[n_l(\tau)]\right). \tag{4.6б}$$

Перше рівняння (4.6а) описує дрейфову швидкість $\dot{r}_k$ k-го кластера. Рух кластера як цілого зумовлений флуктуаціями зовнішнього поля η_k і потоком $J(\tau)=2Lj\{2L+\sum_k Q_k G[n_k(\tau)]\}^{-1}$ швидкої компоненти (ефект затягання). Функція $G[n_k(\tau)]=[1-n_k(\tau)]^{-1}+[1-n_k(\tau)]^{-2}$ описує сповільнення дрейфової швидкості зумовлене розширенням кластера. Друге рівняння (4.6б) описує швидкість розширення кластера, яка визначається коефіцієнтом дифузії $D[r_k(\tau)] = 1 - (m_1 + m_2)/2 + J(\tau) r_k(\tau)$, що залежить від положення кластера, і дрейфовими швидкостями $JG(n_k)$ інших кластерів, див. (4.6а). Зауважимо, що величина $j=-\Delta u/(2L) \ll 1$ природно виступає в ролі малого параметра, оскільки $|\Delta u|=|u_2-u_1|\leqslant 1$.

По суті, рівняння (4.6) описують броунівську динаміку проникних кластерів, що розширюються, знаходячись в потоці швидкої компоненти. Для зручності, далі ми будемо розглядати систему лише двох кластерів, ідентичних в початковий момент часу, $Q = Q_{1(2)}$, $R(0) = R_{1(2)}(0)$, з δ-корельованими флуктуаціями, $\langle \eta_k(\tau)\eta_l(\tau')\rangle = \Gamma\delta_{kl}\delta(\tau - \tau')$.

Нас цікавить відгук одного кластера на збурення швидкості, в початковий момент часу, іншого кластера. Для цього, розглянемо парну кореляційну функцію флуктуацій швидкості $C_{12}(\tau) = \langle \delta v_1(\tau)\delta v_2(0)\rangle = \langle [\dot{r}_1(\tau) - \bar{v}_1(\tau)][\dot{r}_2(0) - \bar{v}_2(0)]\rangle$, $\bar{v}_k(\tau) = \dot{\bar{r}}_k(\tau)$, де $\bar{r}_k(\tau)$ задовольняє «незбуреним» рівнянням (4.6) (тобто рівнянням (4.6) при $\eta_k(\tau) \equiv 0$). Вважаючи флуктуації $\eta_k(t)$ малими, $\nu_n^{-1}|\eta_k| \ll |\bar{v}_k(t)|$, і користуючись теорією збурень по $\nu_n^{-1}|\eta_k|$ та j (припускається, що $j^2 \ll \nu_n^{-1}|\eta_k| \ll j$), можна отримати:

$$C_{12}(\tau) \approx \nu_n^{-2} j^3 \frac{24\Gamma Q}{D_0}\left(\frac{R(\tau)}{[R(\tau) - Q]^4} + \frac{2QR(\tau)}{[R(\tau) - Q]^5} - \frac{C_0 R(\tau)}{[R(\tau) - Q]^3}\right), \quad (4.7)$$

де $R(\tau) = [24D\tau + R^2(0)]^{1/2}$, $D_0 = 1 - (u_1 + u_2)/2$, $C_0 = [R(0) + Q]/[R(0) - Q]^2$.

Кореляційна функція (4.7), Рис. 4.1, має довгочасний від'ємний хвіст з характерною асимптотикою

$$C_{12}(\tau \to \infty) \simeq -\tau^{-1}.$$

Таким чином, виявляється, що довгочасні кореляції між двома дифузійними кластерами мають такий же характер, як і гідродинамічні кореляції, що виникають між колоїдними частинками в одновимірному каналі, заповненому рідиною [39].

Зазначимо, що кореляції у дво- та тривимірному випадках також можна розглянути на основі розвиненого підходу з використанням наближення однорідного кластера.

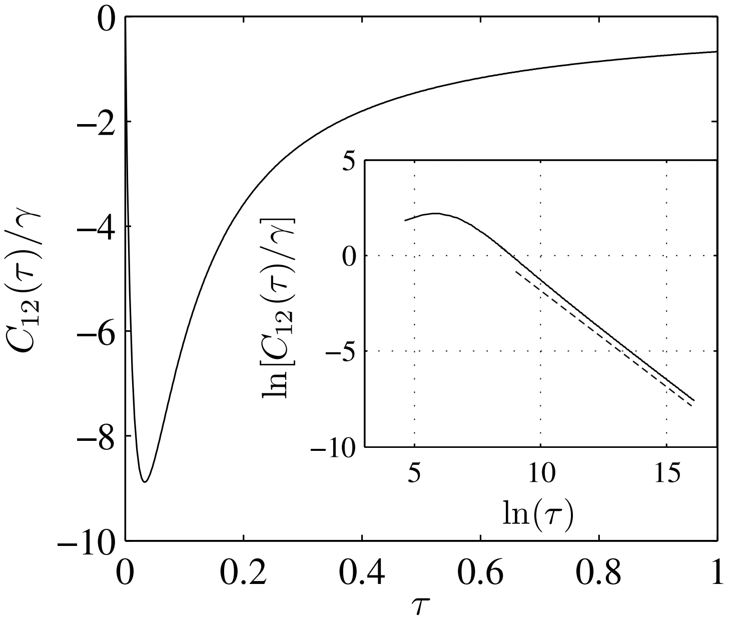


Рис. 4.1. Крос-кореляційна функція швидкостей для пари кластерів як функція часу [$Q = 0.5$, $R(0) = 1$, $\Delta m = 1$, $\gamma = 24\Gamma Q j^3/(D_0 \nu_n^2)$]. Внутрішній графік показує асимптотичну поведінку на великих часах, нахил штрихової лінії відповідає показнику 1.

4.2 Дифузійний транспорт в неоднорідному середовищі як граничний випадок

Транспорт речовини в неоднорідних середовищах та складних системах часто підпорядковується некласичним законам дифузії та супроводжується проявами специфічних транспортних ефектів [116–118]. При вивченні цих ефектів часто зустрічається ситуація, коли релаксація неоднорідності густини відбувається шляхом, що, на перший погляд, суперечить інтуїтивно очікуваному, а саме, коли замість очікуваного розпливання неоднорідність густини стискується, принаймні протягом певного відрізку часу. Іншими словами, перенесення маси направлене з області з меншою концентрацією до області з більшою концентрацією. Зокрема, така поведінка виникає в системах з абсолютною від'ємною рухливістю чи від'ємним коефіцієнтом дифузії.

Явище абсолютної від'ємної рухливості чи від'ємного коефіцієнта дифузії може бути пов'язане з різними причинами. Зокрема, воно може бути результатом часових чи міжчастинкових кореляцій або результатом нерівноважності процесу. Цей ефект був продемонстрований для, наприклад, електрон-діркової плазми, як ефект захоплення електронів, обумовлений розсіянням електронів на дірках [119]. Інший приклад, моделі броунівських частинок зі взаємодією [120–122] чи ґратковий газ зі взаємодією [73]. Ще один приклад, нерівноважна динаміка броунівської частинки в періодичному одновимірному потенціалі чи квазіодновимірному каналі за наявності зовнішньої періодичної в часі сили [123–125]. Від'ємний знак коефіцієнта дифузії може вказувати на нерівноважність системи і свідчити про формування нової фази, наприклад, ріст зародків при фазовому переході першого роду [73, 126] чи про колапс електрон-діркової плазми, який може бути пов'язаний з утворенням нової фази — екситонів [74].

Явище перенесення маси від області з низькою до області з високою концентрацією також може бути результатом наявності додаткової взаємодії в системі, яка спричиняє дрейф частинок. В цьому випадку, релаксація неоднорідності густини визначається як дифузійним механізмом, так і наявним в системі дрейфовим потоком. Прикладом може бути релаксація неоднорідності густини електронного газу на фоні рівномірного розподілу дірок, яка відбувається як за рахунок дифузії так і за рахунок кулонівської взаємодії, викликаної неоднорідним розподілом електронів [74]. Релаксація, спровокована цією взаємодією, може відбуватися набагато швидше ніж релаксація звичайним дифузійним механізмом. Подібний ефект може також бути результатом взаємодії речовини із середовищем в якому вона зазнає релаксації. Простий, хоча й чисто умоглядний приклад такої релаксації — це ефект незмочуваності поверхні, спричинений взаємодією між краплиною рідини та поверхнею (середовищем). Аналогічний ефект, але в дифузійних системах, розглядається в даному пункті. Тут буде продемонстровано, що такий ефект природним чином виникає для частинок, що дифундують в неоднорідному середовищі. А саме, динаміка релаксації розподілу густини в субдифузійному режимі може локально супроводжуватися стисненням розподілу густини.

Щоб показати ці ефекти, ми знову звертаємось до найпростішої моделі двокомпонентного ґраткового газу. В граничному випадку, коли одна з компонент газу нерухома, ця модель описує перенесення мобільної компоненти в неоднорідному середовищі. Інша причина для використання цієї моделі це виникнення ефектів захоплення в її рамках при наявності зовнішнього поля та ненульових рухливостях обох компонент [50,62]. Ще одна аргументація: абсолютна від'ємна рухливість може виникати як наслідок немарківської динаміки в системі [127]. Двокомпонентний ґратковий газ також демонструє ефекти пам'яті, наприклад, кореляція між стрибками міченого атома та її вплив на дифузію трейсера була проаналізована в [52, 118]. Ця кореляція характеризує тенденцію міченого атома повертатися на своє попереднє положення і пов'язана вона з: (i) наявністю різних сортів частинок, тобто можливістю їх розрізнення, та (ii) умовою виключеного об'єму. Формально, такі «зворотні кореляції» описують відштовхування міченого атома від іншої компоненти.

В цьому пункті ми будемо цікавитися тим, як проявляється ефект захоплення в граничному випадку, коли рухливість n-частинок мала і нею можна знехтувати порівняно з рухливістю m-частинок, $\nu_n \ll \nu_m$. Зрозуміло, що цей граничний випадок можна розглядати як наближену модель перенесення маси в неоднорідному середовищі. В такому випадку дифузія мобільних m-частинок відбуватиметься по вакантних вузлах, не заповнених n-частинками. Дійсно, розглядаючи компоненту n як статичну, отримуємо рівняння на густину мобільної компоненти m:

$$\frac{dm}{dt} = \boldsymbol{\nabla}[(1-n)\boldsymbol{\nabla} m + m\boldsymbol{\nabla} n] = (1-n)\nabla^2 m + m\nabla^2 n, \tag{4.8}$$

де $t = \nu_m \tau$. Рівняння (4.8) описує адвекцію-дифузію зі стисни́м потоком ($\nabla^2 n \neq 0$). Рівняння такого типу часто використовуються для опису транспорту в різних системах [116, 117]. В нашому випадку дрейфовий потік, $\sim m\nabla n$, пов'язаний з відштовхуванням мобільних частинок від статичної (фіксованої) компоненти. Таким чином, релаксація неоднорідності густини відбувається як через дифузійний механізм так і в результаті взаємодії мобільних частинок з «внутрішнім» полем ∇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 $\zeta \neq 1/2$ — показник аномальної дифузії [116]. В цьому розділі буде продемонстровано, що перенесення маси від області з меншою щільністю до області з більшою щільністю в неоднорідному середовищі може локально супроводжувати субдифузійний процес ($\zeta < 1/2$). При цьому така інтегральна характеристика, як корінь середньоквадратичного відхилення R не описує релаксаційний процес належним чином. На відміну від випадку звичайної дифузії, рух фронту пакета $r_f(t)$ не співпадає з часовою залежністю кореня середньоквадратичного відхилення.

Дійсно, при порівняно малих значеннях градієнта ∇m перенесення маси визначається другим доданком в правій частині рівняння (4.8), $\dot{m} \approx m\nabla^2 n$, що, принаймні на малих часах, призводить до залежності

$$m(r,t) \approx m(r,0)\exp(t\nabla^2 n(r)). \tag{4.9}$$

Поведінка профілю густини $m(r,t)$ в околі мінімумів і максимумів розподілу $n(r)$ різна. В околі мінімумів, де $n(r_{min} + \delta r) \approx n_{min}(1 + q^2(\delta r)^2)$, рухливі частинки накопичуються, тобто, початковий профіль стискається

$$m(r,t) \approx m(r,0)\exp(tq^2 n_{min}), \tag{4.10}$$

що означає локальний процес перенесення маси в напрямку до більших концентрацій. І навпаки, спостерігається відтік рухливих частинок з області поблизу мінімумів, де $n(r_{max} + \delta r) \approx n_{max}(1 - q^2(\delta r)^2)$, що можна інтерпретувати, як витискання мобільної компоненти фіксованою

$$m(r,t) \approx m(r,0)\exp(-tq^2 n_{max}). \tag{4.11}$$

Така експоненційна динаміка свідчить про присутність процесів, які швидші ніж звичайний дифузійний процес, і які локально, на малих часах, призводять до залежності $R_{loc} \sim t$, тоді як для аномальної дифузії $R \sim t^{\zeta}$, де $\zeta < 1$. В цьому сенсі така глобальна інтегральна характеристика, як корінь середньоквадратичного відхилення

$$R(t) = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \left(\frac{\int x^2 m(x,t)\,dx}{\int m(x,t)\,dx} \right)^{1/2} \tag{4.12}$$

може бути непридатною для опису дифузійного процесу, оскільки вона втрачає інформацію про швидкі локальні процеси.

4.2.1 Фрагментація пакета і стрибкоподібний рух положення його фронту

Щоб проілюструвати особливості транспорту в неоднорідному середовищі, які дає рівняння (4.8), ми розглянемо процес релаксації в квазі одновимірному випадку, тобто вважаємо, що поперечний розмір $L_\perp$ системи менший ніж або того ж порядку, що й характерний розмір неоднорідності для m та n, $L_\perp \leqslant l_m \sim l_n$. Рівняння (4.8) в такому випадку зведеться до:

$$\dot{m} = (1-n)\partial_x^2 m + m\partial_x^2 n, \tag{4.13}$$

де ∂_x — одновимірна похідна за просторовою координатою.

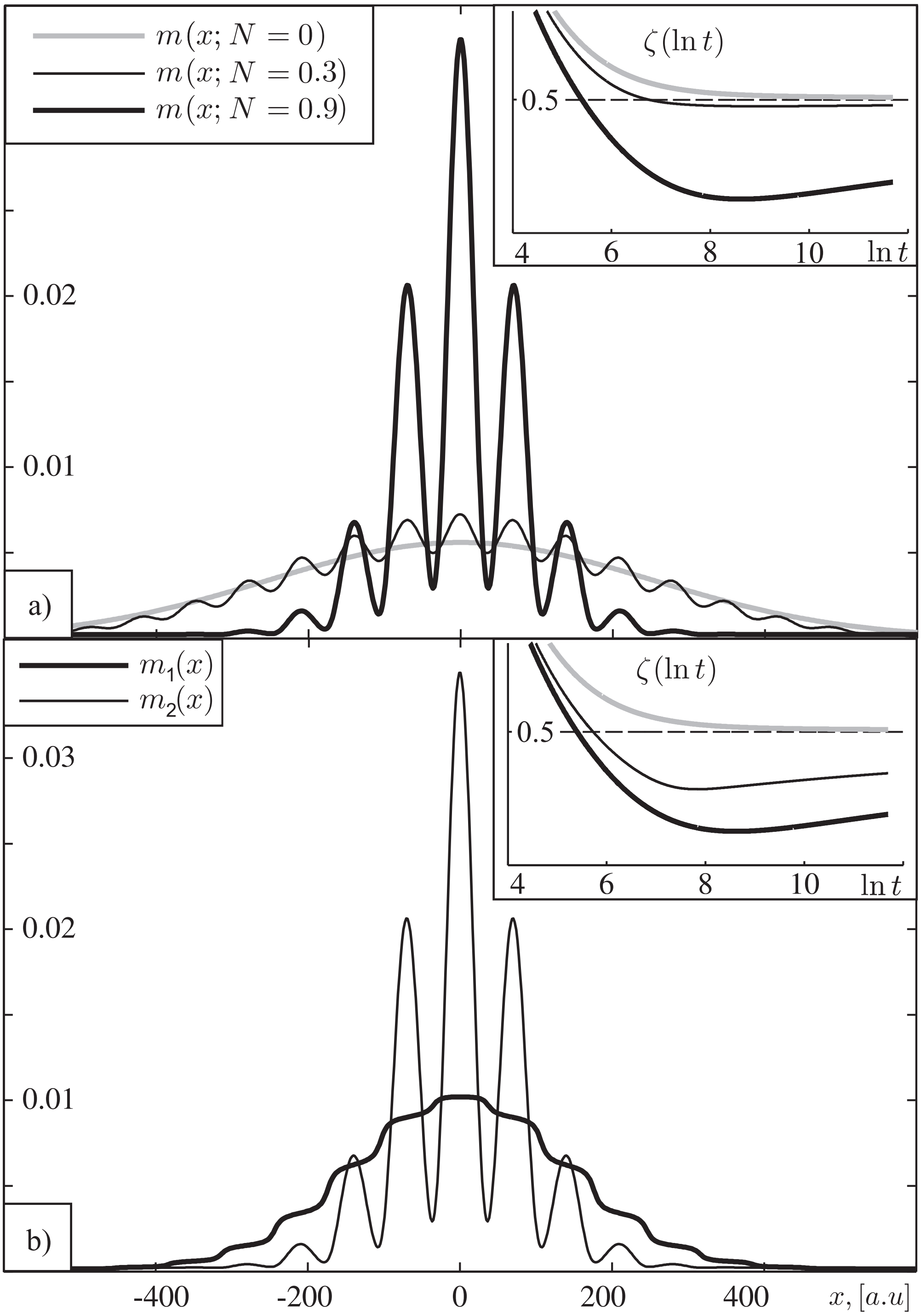


Рис. 4.2. *а*) Розподіл густини $m(x, t)$ для різних значень N при $t = 31888$; *б*) $m_1(x)$ це розподіл густини, який дає рівняння $\dot{m}_1 = \partial_x[(1-n)\partial_x m_1]$, $m_2(x)$ є розв'язком рівняння (4.13). Внутрішні графіки демонструють відповідні залежності для індекса $\zeta(\ln t) = \ln R(t)/\ln t$, де $R(t)$ задано виразом (4.12). Початкова амплітуда $M = 0.1$, початкова півширина $\sqrt{2}l = 14.14$ і $k_0 = 0.1$ використані для обох випадків *а*) та *б*).

Будемо розглядати розпливання початкового гаусового розподілу

$$m(x, 0) = M \exp(-x^2/4l^2) \tag{4.14}$$

в періодичному потенціалі зафіксованої компоненти

$$n(x) = (N/2)(1 - \cos k_0 x). \tag{4.15}$$

Ступінь неоднорідності середовища буде визначатися амплітудою N та періодом $2\pi k_0^{-1}$ замороженої компоненти.

Як видно з Рис. 4.2*а*, неоднорідність середовища сповільнює розпливання пакета. Таке сповільнення можна пов'язати зі зменшенням ефективного коефіцієнта дифузії та/чи зі зменшенням величини індексу ζ, що вказує на субдифузійний режим процесу (див. внутрішній графік на Рис. 4.2*а*). Однак схожу поведінку індексу ζ (див. внутрішній графік на Рис. 4.2*б*) дає рівняння (4.13) і тоді коли в ньому присутній лише дифузійний член, тобто $\dot{m} = \partial_x[(1-n)\partial_x m]$, хоча релаксаційний процес в цьому випадку має дещо інший характер, Рис. 4.2*б*.

Фрагментація пакета пов'язана з другим членом рівняння (4.8), котрий описує відштовхування мобільної компоненти від зафіксованої. Якщо цей член домінує, то перенесення маси відбувається відбувається головним чином саме через цю взаємодію, а не через дифузійний механізм за який відповідає перший доданок в правій частині рівняння (4.8).

Як безпосередньо випливає з рівняння (4.8), локальний потік $\mathbf{j}_m$ мобільної компоненти визначається двома доданками

$$\mathbf{j}_m = -(1-n)\partial_x m - m\partial_x n. \tag{4.16}$$

Перший, $\mathbf{j}_m^d = -(1-n)\partial_x m \sim -(1-n)(m/l_m)$, де l_m - характерна величина зміни $m(x,t)$ поблизу точки x, описує стандартне дифузійне розпливання, тобто, тенденцію до перенесення маси в напрямку до меншої густини.

Присутність замороженої компоненти призводить до перенормування коефіцієнта дифузії на $1-n$. Зафіксована компонента відіграє роль бар'єра для рухливих частинок. Зі зростанням концентрації $n(x)$ (висоти бар'єра) швидкість проходження через бар'єр рухливих частинок (дифузійний потік $\mathbf{j}_m^d$) зменшується як $1-n$. Дрейфовий (чи гідродинамічний)

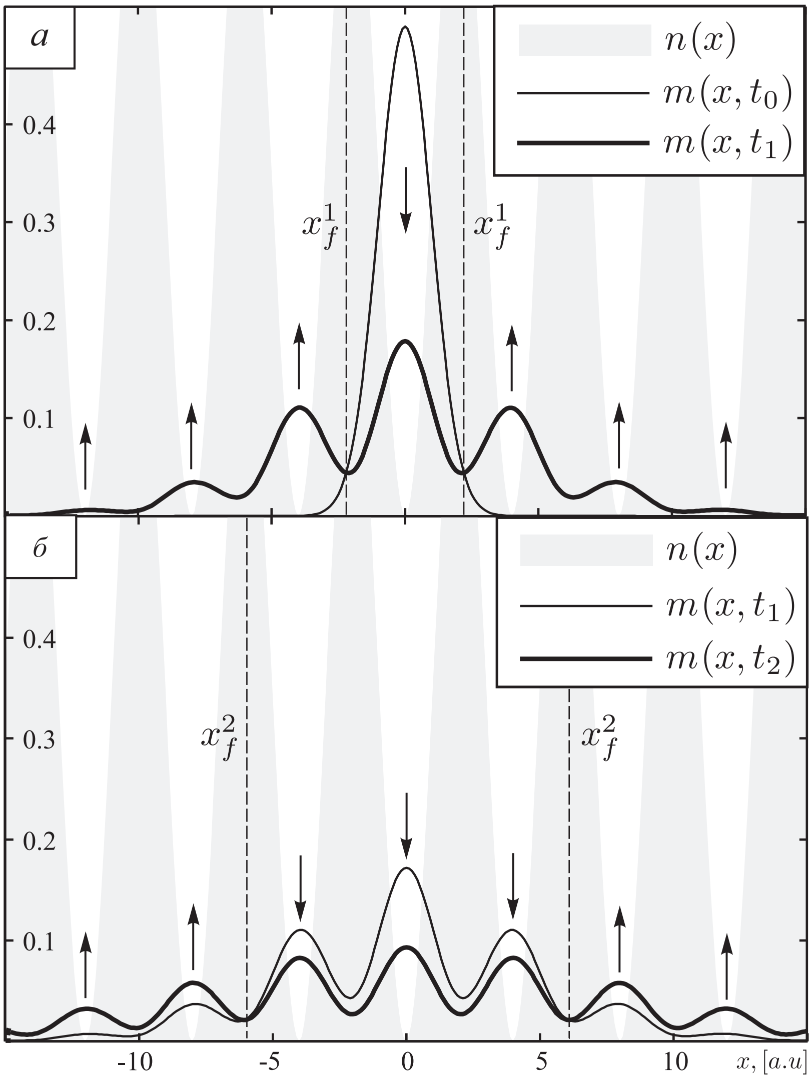


Рис. 4.3. Динаміка розпливання пакета на інтервалах часу: a) $[t_0, t_1]$, b) $[t_1, t_2]$; ($t_0 = 0,\ t_1 = 14 \times 10^3,\ t_2 = 45 \times 10^3$ одиниць часу). Початкова амплітуда $M = 0.5$, амплітуда замороженої компоненти $N = 0.7$. Зафіксована компонента $n(x)$ задана виразом (4.15), стрілки вказують чи даний суб-пакет стискується (зростає) ($\uparrow$) чи розпливається ($\downarrow$) протягом конкретного інтервалу часу. Штрихові лінії x_f^i вказують місце, де в основному локалізуються фронт пакета протягом відповідного часового інтервалу.

потік $\mathbf{j}^h_m \propto -m\partial_x n \sim -m(nk_0)$ можна інтерпретувати як такий, що описує відштовхування мобільних частинок від нерухомих. Потоки $\mathbf{j}^d_m$ та $\mathbf{j}^h_m$, які визначаються градієнтами концентрацій $\partial_x m$ та $\partial_x n$, можуть мати різні знаки і поводитися як два конкурентні потоки.

Рисунок 4.3 ілюструє розпливання початкового гаусового розподілу. Проходження фронту через перший бар'єр неоднорідності до сусіднього локального мінімуму профілю густини (зображено на Рис. 4.3*а*) складається з двох етапів. На першому, частинки локально акумулюються в мінімумі, через домінування доданка $\mathbf{j}^h_m$ до тих пір поки умова $2/N - 1 > l_m k_0$ для профілю $m(x,t)$ виконується. Вираз $2/N - 1 > l_m k_0$ визначає умову для дифузійного проходження через бар'єр. Потім такий же процес повторюється для наступного локального мінімума, в той час як в попередньому мінімумі

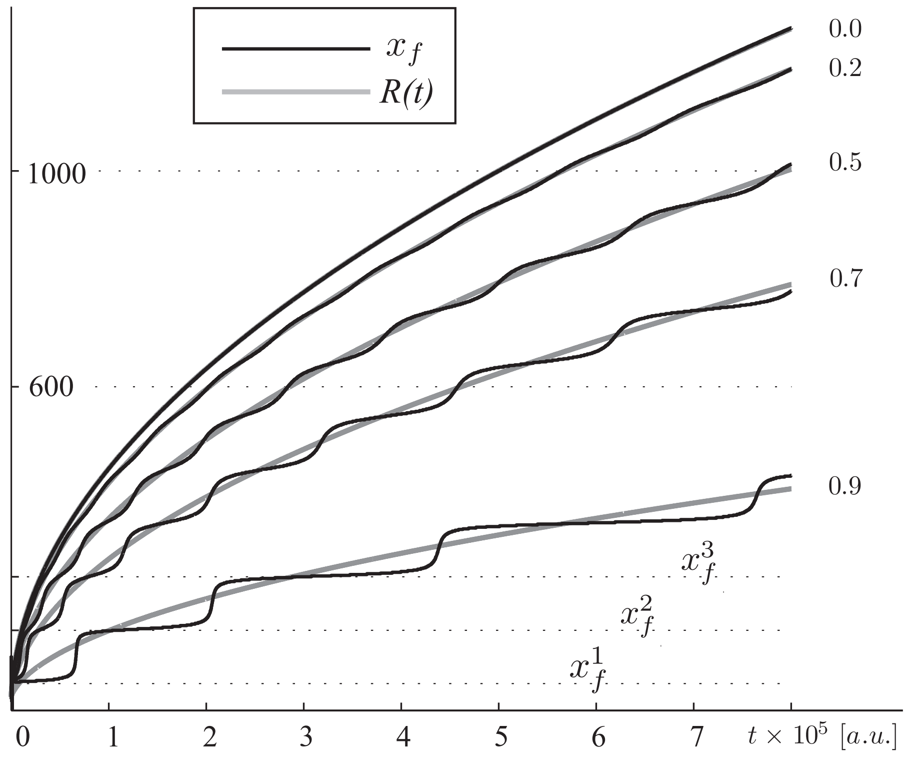


Рис. 4.4. Часова залежність фронту пакета $x_f(t)$, означеного як точка де $\dot{m} = 0$, та корінь середньоквадратичного відхилення $R(t)$, який визначається виразом (4.12), при різних значеннях N. Числа біля кривих вказують відповідні значення N. Горизонтальні лінії x^i_f відповідають вертикальним x^i_f на Рис. 4.3*а* та *б*.

відбувається вже звичайне розпливання суб-пакета, Рис. 4.3*б*. Такий поетапний процес відображається на поведінці фронту пакета, положення якого визначається умовою $\dot{m}(x_f, t) = 0$, див. Рис. 4.4.

Фронт $x_f(t)$ розділяє вісь x на дві області: (i) $|x| < x_f$, де концентрація $m(x,t)$ зменшується для будь-якого x і релаксація густини відбувається головним чином шляхом дифузії з перенормованим коефіцієнтом дифузії; (ii) $|x| > x_f$, де густина зростає і на процес релаксації сильно впливає відштовхування від замороженої компоненти (неоднорідності середовища). Останнє призводить до локального стиснення та збільшення густини.

Як видно з Рис. 4.4, неоднорідність середовища, яка в нашому випадку визначається амплітудою N, призводить до появи різниці між рухом фронту пакета $x_f(t)$ та динамікою кореня середньоквадратичного відхилення $R(t)$, в той час як для звичайної дифузії ці дві величини співпадають. Рух фронту $x_f(t)$ складається з двох, лінійних за часом, швидкого й повільного процесів. Фронт пакету переважно локалізується в бар'єрах неоднорідності, але виконує швидкі стрибки з бар'єру в бар'єр, в той час як корінь середньоквадратичного зміщення (вираз (4.12)) дає лише деяку середню динаміку руху фронту, яка в середньому задовольняє режиму субдифузії, див. Рис. 4.4.

4.2.2 Стиснення початкового розподілу

Стиснення (зростання) розподілу густини може також виникати для початкового профілю на певному відрізку часу. Так, з рівняння (4.8), (4.14) та (4.15) можна оцінити поведінку амплітуди в точці, що відповідає піку розподілу густини на малих часах

$$m(0,t) \approx M + \frac{Mt}{2l^2}(Nk_0^2 l^2 - 1). \tag{4.17}$$

Амплітуда $m(0,t)$ має тенденцію до зростання при $N > (k_0 l)^{-2}$. З іншого боку, стиснення розподілу густини означає, що швидкість (похідна за часом) середньоквадратичного відхилення $v(t) = d\langle x^2\rangle/dt$ є від'ємною. Таку оцінку зручно робити у фур'є-представленні:

$$v(t) = -\frac{1}{m_0}\partial_k^2 \dot{m}_k\big|_{k=0}, \tag{4.18}$$

де $m_k(t)$ — фур'є образ $m(x,t)$ який задовольняє рівнянню

$$\begin{aligned} \dot{m}_k = -(N/4)[(k^2 - 2kk_0)m_{k-k_0}] - \\ -(N/4)[(k^2 + 2kk_0)m_{k+k_0}] - k^2[1-(N/2)]m_k. \end{aligned} \tag{4.19}$$

Так як $v(t)$ визначається лімітом $k \to 0$, апроксимуємо рівняння (4.19) розкладом в ряд по малих k ($k \ll k_0$):

$$\begin{aligned} \dot{m}_k \approx -k^2[1-(N/2)]m_k - (N/2)k^2 m_{k_0} - \\ - Nk^2 k_0 \frac{\partial}{\partial k_0} m_{k_0} - (1/4)Nk^4 \frac{\partial^2}{\partial k_0^2} m_{k_0}, \end{aligned} \tag{4.20}$$

де було опущено доданки з $m_{2k_0} \approx 0$, вважаючи, що характерний розмір неоднорідності для $m(x,t)$ порядку або менше ніж $n(x)$, тобто, $k \leqslant k_0$. Беручи границю $k \to 0$, отримуємо вираз для швидкості:

$$v \approx (2-N) - \frac{N}{m_0}\left(1 + 2k_0 \frac{\partial}{\partial k_0}\right) m_{k_0}. \tag{4.21}$$

Тут m_{k_0} визначається рівнянням

$$\dot{m}_{k_0} \approx -k_0^2\left(1 - \frac{N}{2}\right) m_{k_0} + \frac{N}{4} m_0. \tag{4.22}$$

З (4.21) безпосередньо випливає умова на стиснення пакета ($v < 0$), див. внутрішній графік на Рис. 4.5,

$$2/N < 1 + (4k_0^2 l^2 - 1)\exp(-k_0^2 l^2). \tag{4.23}$$

Чисельний розв'язок рівняння (4.13), який відповідає такому випадку показаний на Рис. 4.5. Стиснення триває протягом певного інтервалу часу після якого дифузія відбувається шляхом почергового долання бар'єрів неоднорідності (як це обговорювалось в попередньому підрозділі). Зауважимо, що оцінка (4.23) є досить грубою і початкове стискання розподілу насправді може виникати і при менших значеннях амплітуди N, як це по-

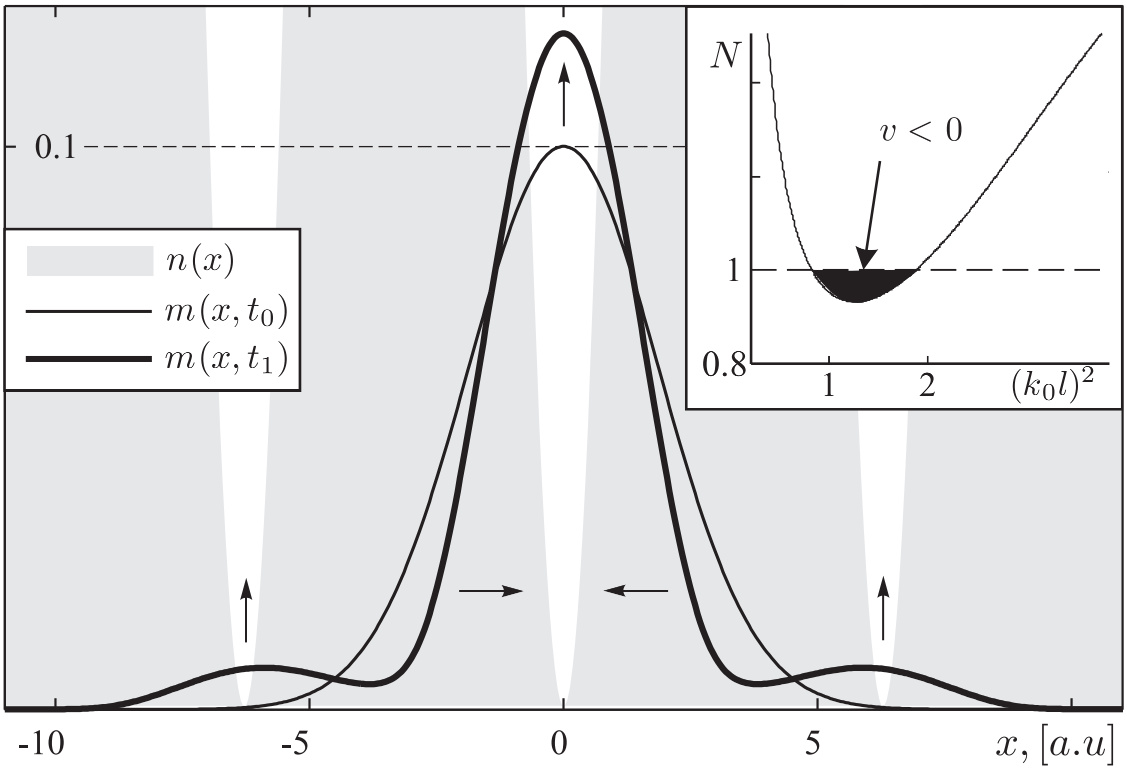


Рис. 4.5. Стискання початкового профілю густини мобільної компоненти протягом інтервалу часу $[t_0, t_1]$, ($t_0 = 0,\ t_1 = 3 \times 10^4$ одиниць часу). Початкова амплітуда $M = 0.1$, $N = 0.9$, початкова півширина $\sqrt{2}l = 1.7$ та $k_0 = 1.05$. Розподіл густини замороженої компоненти $n(x)$, задається рівнянням (4.15), стрілки вказують напрям еволюції пакету. Замальована область на внутрішньому графіку визначена нерівністю (4.23) та умовою $N < 1$, і відповідає від'ємній швидкості руху пакета.

казано на Рис. 4.5.

Таким чином, присутність другого сорту частинок в ґратковому газі призводить до специфічних транспортних ефектів. Так, у випадку двокомпонентного газу на транспорт маси впливає додатковий потік, який відсутній в однокомпонентному газі нерозрізнюваних частинок. Цей потік пов'язаний зі змішуванням різних компонент газу і за наявності взаємодії між частинками (умова виключеного об'єму в нашому випадку) і може призводити до захоплення частинок одного сорту частинками іншого сорту. Якщо ж частинки одного з сортів мають настільки малу рухливість що нею можна знехтувати порівняно з рухливістю частинок іншого сорту, тобто один з сортів є нерухомим, то змішуючий потік чи його частина перетворюється в стаціонарний дрейфовий потік, який теж може спричиняти рух мобільних частинок. Як результат, релаксація густини відбувається через дифузійний механізм та/чи дію стаціонарного дрейфового потоку.

4.2.3 Стаціонарний випадок

Як було показано в попередньому розділі, неоднорідність середовища може призводити до локального накопичення частинок, тобто до локального перенесення речовини від області з меншою густиною до області з більшою густиною. Такий транспорт речовини може бути реалізований також і на великих масштабах, а саме, перенесення речовини може відбуватися через всю систему від границі з меншою густиною до границі з більшою при довільному розподілі $n(x)$ у стаціонарному випадку. Для ілюстрації можливості цього транспорту розглянемо квазі одномірну граничну задачу:

$$(1-n)\partial_x^2 m + m\partial_x^2 n = 0 \tag{4.24}$$

з граничними умовами

$$m(0) = m(0), \quad m(L) = m(L), \tag{4.25}$$

де L — довжина підкладки. Розв'язок рівняння (4.24) має форму

$$m(x) = (1 - n(x))\left(\frac{m(0)}{1 - n(0)} - J\int\limits_0^x \frac{d\xi}{(1 - n(\xi))^2}\right), \tag{4.26}$$

де J — повний потік частинок через систему

$$J = -\left(\int\limits_0^L \frac{d\xi}{[1 - n(\xi)]^2}\right)^{-1}\left(\frac{m(L)}{1 - n(L)} - \frac{m(0)}{1 - n(0)}\right) = \frac{1}{L}\int\limits_0^L \mathbf{j}_m(x)\ dx. \tag{4.27}$$

В останньому виразі $\mathbf{j}_m(x)$ визначається рівнянням (4.16).

Легко бачити, що стаціонарний розподіл густини $m(x)$ може бути неоднорідним навіть якщо концентрації на границях $m(L) = m(0)$ рівні.

Як вже згадувалось, транспорт маси в неоднорідному середовищі визначається не лише середнім значенням градієнта поля $m(x)$, але також полем n. Як безпосередньо випливає з рівняння (4.16) транспорт речовини може бути направлений від нижчих концентрацій в сторону вищих. Так, якщо $m(L) > m(0)$, то потік J буде направленим в сторону вищих концентрацій, тобто, від границі $x = 0$ до границі $x = L$, якщо виконується умова

$$\frac{m(L)}{m(0)} < \frac{1 - n(L)}{1 - n(0)}. \tag{4.28}$$

Таким чином, напрям повного потоку визначається значеннями обох компонент m та n на границях, що в свою чергу означає нестійкість розв'язку по відношенню до граничних умов на «легкої» компоненти m у разі випадкового розподілу для n.

4.3 Висновки

В пункті 4.1 показано, що у двокомпонентному ґратковому газі при значній різниці між рухливостями частинок кожного сорту виникають індуковані кореляції в повільній підсистемі, опосередковані швидкою підсистемою. Їх проявом є характерний від'ємний довгочасний хвіст парної кореляційної функції швидкостей, що дуже нагадує добре відомі довгочасні кореляції між колоїдними частинками [39, 41].

В пункті 4.2 показано, що релаксація густини в сильнонеоднорідному 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 в середньому задовольняє режиму субдифузії.

Результати пунктів 4.1 та 4.2 опубліковані в роботах [67] та [49], відповідно.

ВИСНОВКИ

В дисертаційний роботі отримано наступні результати:

1. Продемонстровано ефект інверсії сліду від включення в потоці газу з короткосяжним міжчастинковим відштовхуванням. На прикладі моделі Ленґмюрового ґраткового 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 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,
   - розсіяння потоку газу суттєво підсилюється при гетерогенній фрагментації суцільного включення на кластер домішок;

- амплітуда розсіяння (а також підсилення і прискорення ударної хвилі) на кластері з випадково неоднорідним розподілом домішок є значно більшою, порівняно з впорядкованим розподілом домішок;
- 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.
- показано наявність генерації кластером солітоноподібних структур типу лавин або передвісника.
- показано присутність сильних локальних флуктуацій розсіяного поля всередині кластера.

6. Продемонстровано наявність індукованих від'ємних довгочасових кореляцій у двокомпонентному ґратковому Ленґмюровому газі. Показано, що індуковані швидкою підсистемою в повільній підсистемі кореляції мають таку ж асимптотичну поведінку з характерним від'ємним довгочасовим (степеневим) хвостом кореляційної функції швидкостей як і ті, що спостерігаються між колоїдними частинками в одновимірних, заповнених рідиною каналах.
7. Показано, що релаксація густини в сильнонеоднорідному 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.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Lord Kelvin* «Deep water ship-waves». — Proceedings of the Royal Society of Edinburgh. — 1906. — Vol. 25, № 1. — P. 562–587.
2. *Биркгоф Г., Сарантонелло Э.* Струи, следы и каверны. — М.: Мир, 1964. — 468 с.
3. *Batchelor G. K.* An Introduction to Fluid Dynamics. — New York: Cambridge University Press, 2000. — 615 p.
4. *Лэмб Г.* Гидродинамика. — М.-Л.: ОГИЗ, 1947. — 928 с.
5. *Couairon A.* Femtosecond filamentation in transparent media / A. Couairon, A. Mysyrowicz // Phys. Rep. — 2007. — Vol. 441. — P. 47.
6. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Электродинамика сплошных сред. — М.: Наука, 1982. — 624 с. — («Теоретическая физика», том VIII).
7. *Démery V.* Drag forces in classical fields / V. Démery, D. S. Dean // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Vol. 104. — P. 080601.
8. *Bartnick J.* Emerging activity in bilayered dispersions with wake-mediated interactions / Jörg Bartnick, Andreas Kaiser, Hartmut Löwen, Alexei V. Ivlev // J. Chem. Phys. — 2016. — Vol. 144. — P. 224901.
9. *Ivlev A. V.* Statistical Mechanics where Newton's Third Law is Broken / A. V. Ivlev, J. Bartnick, M. Heinen, C.-R. Du, V. Nosenko, H. Löwen // Phys. Rev. X. — 2015. — Vol. 5. — P. 011035.
10. *Zhukhovitskii D. I.* Subsonic Motion of a Projectile in a Fluid Complex Plasma under Microgravity Conditions / Zhukhovitskii D. I., Fortov V. E., Molotkov V. I., Lipaev A. M., Naumkin V. N., Thomas H. M., Ivlev A. V., Morfill G. E. // Ukr. J. Phys. — 2014. — Vol. 59, № 4. — P. 385–385.
11. *Sriram I.* Out-of-equilibrium forces between colloids / I. Sriram, E. M. Furst // Soft Matter. — 2012. — Vol. 8. — P. 3335.

12. *Sriram I.* Two spheres translating in tandem through a colloidal suspension / I. Sriram, E. M. Furst // Phys. Rev. E. — 2015. — Vol. 91. — P. 042303.
13. *Гладуш Ю. Г.* Генерация линейных волн при обтекании препятствий бозе-эйнштейновским конденсатом / Ю. Г. Гладуш, А. М. Камчатнов // ЖЭТФ. — 2007. — Vol. 132. — C. 589.
14. *Kamchatnov A. M.* Stabilization of solitons generated by a supersonic flow of bose-einstein condensate past an obstacle / A. M. Kamchatnov, L. P. Pitaevskii // Phys. Rev. Lett. — 2008 Vol. 100. — P. 160402.
15. *Миронов В. А.* Структура кильватерного следа за потенциальными барьерами, движущимися в бозе-эйнштейновском конденсате / В. А. Миронов, А. И. Смирнов, Л. А. Смирнов // ЖЭТФ. — 2010. — Vol. 137. — C. 1004.
16. *Roberts D. C.* Casimir-like force arising from quantum fluctuations in a slowly moving dilute bose-einstein condensate / D. C. Roberts, Y. Pomeau // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Vol. 95. — P. 145303.
17. *Пайнс Д., Нозьер Ф.* Теория квантовых жидкостей: Нормальные ферми-жидкости. — М.: Мир, 1967. — 384 с.
18. *Bénichou O.* Directed random walk in adsorbed monolayer / O. Bénichou, A. M. Cazabat, M. Moreau, G. Oshanin // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 1999. — V. 272. — P. 56.
19. *Bénichou O.* Stokes formula and density perturbances for driven tracer diffusion in an adsorbed monolayer / O. Bénichou, A.M. Cazabat, J. De Coninck, M. Moreau, G. Oshanin // Phys. Rev. Lett. — 2000. — Vol. 84. — P. 511.
20. *Bénichou O.* Generalized model for dynamic percolation / Bénichou O., J. Klafter, M. Moreau, G. Oshanin // Phys. Rev. E. — 2000. — Vol. 62, № 3. — P. 3327.
21. *Bénichou O.* Force-velocity relation and density profiles for biased diffusion in an adsorbed monolayer / O. Bénichou, A. M. Cazabat, J. De Coninck,

M. Moreau, G. Oshanin // Physical Review B. — 2001. — Vol. 63, № 23. — P. 235413.

22. *De Coninck J.* Dynamics of a driven probe molecule in a liquid monolayer / J. De Coninck, G. Oshanin, M. Moreau // EPL. — 1997. — Vol. 38, № 7. — P. 527.
23. *Bénichou O.* Anomalous field-induced growth of fluctuations in dynamics of a biased intruder moving in a quiescent medium / Olivier Bénichou, Carlos Mejía-Monasterio, Gleb Oshanin // Phys. Rev. E. — 2013. — Vol. 87, № 2. — P. 020103.
24. *Bénichou O.* A biased intruder in a dense quiescent medium: looking beyond the force–velocity relation / O. Bénichou, P. Illien, C. Mejía-Monasterio, G. Oshanin // J. Stat. Mech. — 2013. — Vol. 2013, № 5. — P. P05008.
25. *Dzubiella J.* Depletion forces in nonequilibrium / J. Dzubiella, H. Löwen, C. N. Likos // Phys. Rev. Lett. — 2003. — Vol. 91. — P. 248301.
26. *Wulfert R.* Nonequilibrium depletion interactions in active microrheology / R. Wulfert, U. Seifert, T. Speck // Soft Matter. — 2017. — Vol. 13. — P. 9093.
27. *Krüger M.* Colloid-colloid and colloid-wall interactions in driven suspensions / Matthias Krüger, Markus Rauscher // J. Chem. Phys. — 2007. — Vol. 127. — P. 034905.
28. *Hayashi K.* The law of action and reaction for the effective force in a non-equilibrium colloidal system / Kumiko Hayashi, Shin-ichi Sasa // J. Phys.: Condens. Matter. — 2006. — Vol. 18. — P. 2825.
29. *Khair A. S.* On the motion of two particles translating with equal velocities through a colloidal dispersion / A. S. Khair, J. F. Brady // Proc. R. Soc. A. — 2007. — Vol. 463. — P. 223.
30. *Lekkerkerker H., Tuinier R.* Colloids and the Depletion Interaction. — Berlin: Springer, 2011. — 234 p.

31. *Crocker J. C.* Entropic Attraction and Repulsion in Binary Colloids Probed with a Line Optical Tweezer / J. C. Crocker, J. A. Matteo, A. D. Dinsmore, A. G. Yodh // Phys. Rev. Lett. — 1999. — Vol. 82. — P. 4352.
32. *Asakura S.* On interaction between two bodies immersed in a solution of macromolecules / Sho Asakura, Fumio Oosawa // J. Chem. Phys. — 1954. — Vol. 22, № 7. — P. 1255.
33. *Asakura S.* Interaction between particles suspended in solutions of macromolecules / Sho Asakura, Fumio Oosawa // J. Polym. Sci. — 1958. — Vol. 33, № 126 — P. 183.
34. *Kryuchkov N. P.* Dissipative spinodal decomposition in systems with nonreciprocal effective interactions / N. P. Kryuchkov, L. A. Mistryukova, I. N. Aliev, S. O. Yurchenko // J. Phys.: Conf. Ser. — 2018. — Vol. 1135, № 1. — P. 012093.
35. *Kryuchkov N. P.* Dissipative phase transitions in systems with nonreciprocal effective interactions / Nikita P. Kryuchkov, Alexei V. Ivlev, Stanislav O. Yurchenko // Soft Matter. — 2018. — Vol. 14. — P. 9720.
36. *Лисин Е. А.* Проверка взаимности сил межчастичного взаимодействия в неидеальных системах / Е. А. Лисин, О. С. Ваулина, О. Ф. Петров // ЖЭТФ. — 2017. — Т. 151, № 4. — С. 791–796.
37. *Durve M.* Active particle condensation by non-reciprocal and time-delayed interactions / M. Durve, A. Saha, A. Sayeed // Eur. Phys. J. E. — 2018. — Vol. 41. — P. 49.
38. *Pinheiro M. J.* On Newton's third law and its symmetry-breaking effects / M. J. Pinheiro // Phys. Scr. — 2011. — Vol. 84. — P. 055004.
39. *Frydel D.* Long-Range Dynamic Correlations in Confined Suspensions/ Derek Frydel, Haim Diamant // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Vol. 104. — P. 248302.

40. *Minkel J. R.* Focus: Particles in a Pipe Communicate / J. R. Minkel // Physics. — 2010. — Vol. 25. — P. 23.
41. *Felderhof B. U.* Long-range dynamic correlations in a compressible viscous fluid confined in a circular tube / B. U. Felderhof // J. Chem. Phys. — 2011. — Vol. 134. — P. 024505.
42. *Bitbol A.-F.* Forces exerted by a correlated fluid on embedded inclusions / Anne-Florence Bitbol, Jean-Baptiste Fournier // Phys. Rev. E. — 2011. — Vol. 83. — P. 061107.
43. *Maciołek A.* Collective behavior of colloids due to critical Casimir interactions / Anna Maciołek, Siegfried Dietrich // Rev. Mod. Phys. — 2018. — Vol. 90, № 4. — P. 045001.
44. *Dean D. S.* Out-of-equilibrium behavior of Casimir-type fluctuation-induced forces for free classical fields / D. S. Dean, A. Gopinathan // Phys. Rev. E. — 2010. — Vol. 81. — P. 041126.
45. *Mejía-Monasterio C.* Bias- and bath-mediated pairing of particles driven through a quiescent medium / C. Mejía-Monasterio, G. Oshanin // Soft Matter. — 2011. — Vol 7. — P. 993.
46. *Vasilyev O. A.* Cooperative behavior of biased probes in crowded interacting systems / O. A. Vasilyev, O. Bénichou, C. Mejía-Monasterio, E. R. Weeks, G. Oshanin // Soft Matter. — 2017. — Vol. 13. — P. 7617.
47. *Leitmann S.* Time-dependent perpendicular fluctuations in the driven lattice Lorentz gas / S. Leitmann, T. Schwab, T. Franosch // Phys. Rev. E. — 2018. — Vol. 97. — P. 022101.
48. *Leitmann S.* Time-dependent fluctuations and superdiffusivity in the driven lattice Lorentz gas / S. Leitmann, T. Franosch // Phys. Rev. Lett. — 2017. — Vol. 118. — P. 018001.
49. *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.

50. *Schmittmann B.* Statistical Mechanics of Driven Diffusive Systems / Beate Schmittmann, Royce K. P. Zia. — London: Academic Press, 1995. — 214 p. — (Phase transitions and critical phenomena; Vol. 17; edited by C. Domb and J. L. Lebowitz).
51. *Leung K.-t.* Drifting spatial structures in a system with oppositely driven species / K.-t. Leung, R. K. P. Zia // Phys. Rev. E. — 1997. — Vol. 56. — P. 308.
52. *Tahir-Kheli R. A.* Correlated random walk in lattices: Tracer diffusion at general concentration / R. A. Tahir-Kheli, R. J. Elliott // Phys. Rev. B. — 1983. — Vol. 27. — P. 844.
53. *Tsytovich V. N.* Nonlinear screening of dust grains and structurization of dusty plasma / V. N. Tsytovich, N. G. Gusein-zade // Plasma Phys. Rep. — 2013. — Vol. 39. — P. 515.
54. *Tsytovich V.* Note on Mechanism for Formation of Bulbs (Structures) in Complex Plasmas with Grains of Different Size / V. Tsytovich, R. Suetterlin, H. Thomas, A. Ivlev // Contrib. Plasma Phys. — 2015. — Vol. 55, № 6, P. 494-–497.
55. *Цытович В. Н.* О перспективах экспериментальных и теоретических исследований самоорганизованных пылевых структур в комплексной плазме в условиях микрогравитации / Вадим Николаевич Цытович // УФН. — 2015. — Т. 58, № 2. — С. 150.
56. *Власов А. А.* Теория многих частиц. — М.-Л.: ГИТТЛ, 1950. — 350 с.
57. *Власов А. А.* О теории страт / Власов А. А., Базаров И. П. // ЖЭТФ. — 1950. — Т. 20, № 12. — Р. 1098–1108.
58. *Chernyshuk S. B.* Elastic interaction between colloidal particles in confined nematic liquid crystals / S. B. Chernyshuk, B. I. Lev // Phys. Rev. E. — 2010. — Vol. 81. — P. 041701.

59. *Лев Б. І.* Окремі питання статистичної фізики конеднсованих систем. — Київ: ІТФ, 2008. — 340 с.
60. Дыхне А. М., Юдин Г. Л. Внезапные возмущения и квантовая эволюция. — М.: Редакция журнала «Успехи физических наук», 1996.
61. *Schmittmann B.* Onset of Spatial Structures in Biased Diffusion of Two Species / B. Schmittmann, K. Hwang, R. K. P. Zia // Europhys. Lett. — 1992. — Vol. 19. — P. 19.
62. *Hipolito R. S.* Effects of differential mobility on biased diffusion of two species / R. S. Hipolito, R. K. P. Zia, B. Schmittmann // J. Phys. A: Math. Gen. — 2003. — Vol. 36. — P. 4963.
63. *Sutterlin K. R.* Non-equilibrium phase transitions in complex plasma / K. R. Sutterlin, A. Wysocki, C. Rath, A. V. Ivlev, H. M. Thomas, S. Khrapak, S. Zhdanov, M. Rubin-Zuzic, W. J. Goedheer, V. E. Fortov, A. M. Lipaev, V. I. Molotkov, O. F. Petrov, G. E. Morfill, H. Lowen // Plasma Physics and Controlled Fusion. — 2010. — Vol. 52, №12. — P. 124042.
64. *Chumak A. A.* Diffusion and density fluctuations of atoms adsorbed on solid surfaces / A. A. Chumak, A. A. Tarasenko // Surf. Sci. — 1980. — Vol. 91. — P. 694.
65. *Вихренко В. С.* Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей: монография / В. С. Вихренко, Я. Г. Грода, Г. С. Бокун. — Минск: БГТУ, 2008. — 325 с.
66. *Лепин И. В.* Кинетика релаксации неравновесного решеточного газа / И. В. Лепин // Вопросы атомной науки и техники. — 2002. — № 6. — С. 47–52.
67. *Kliushnychenko O. V.* Induced long-time correlations in a two-component lattice gas / O. V. Kliushnychenko, S. P. Lukyanets // Eur. Phys. J. Spec. Top. — 2013. — Vol. 216. — P. 127.

68. *Клюшниченко А. В.* Эффект блокады и концентрационное переключение «направления» следа включения в решеточном газе / А. В. Клюшниченко, С. П. Лукьянец // ЖЭТФ. — 2014. — Т. 145, № 6. — С. 1106–1115.
69. *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.
70. *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.
71. *Форстер Д.* Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. — М.: Атомиздат, 1980. — 288 с.
72. *Cividini J.* Wake-mediated interaction between driven particles crossing a perpendicular flow / J. Cividini, C. Appert-Rolland // J. Stat. Mech. — 2013. — Vol. 2013. — P. P07015.
73. *Argyrakis P.* Negative diffusion coefficient in a two-dimensional lattice-gas system with attractive nearest-neighbor interactions / P. Argyrakis, A. A. Chumak, M. Maragakis, N. Tsakiris // Phys. Rev. B. — 2009. — Vol. 80. — P. 104203.
74. *Efros A. L.* Negative density of states: Screening, Einstein relation, and negative diffusion / Alexei L. Efros // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 78. — P. 155130.
75. *Тарасенко А. А.* Флуктуации внутри и на поверхности твердых тел / Александр Алексеевич Тарасенко, Александр Александрович Чумак, Петр Михайлович Томчук. — К.: Наукова думка, 1992. — 251 с.
76. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика / Дмитрий Николаевич Зубарев. — М.: Наука, 1971. — 416 с.

77. *Leung K-t.* Novel Phases and Finite-Size Scaling in Two-Species Asymmetric Diffusive Processes / Kwan-tai Leung // Phys. Rev. Lett. — 1994. — Vol. 73. — P. 2386.
78. *Richards P. M.* Theory of one-dimensional hopping conductivity and diffusion / Peter M. Richards // Phys. Rev. B. — 1977. — Vol. 16. — P. 1393.
79. *Burger M.* Nonlinear cross-diffusion with size exclusion / M. Burger, M. Di Francesco, J.-F. Pietschmann, B. Schlake // SIAM J. Math. Anal. — 2010. — Vol. 42. — P. 2842.
80. *Gorban A. N.* Quasichemical models of multicomponent nonlinear diffusion / A. N. Gorban, H. P. Sargsyan, H. A. Wahab // Math. Model. Nat. Phenom. — 2011. — Vol. 6. — P. 184.
81. *Démery V.* Thermal casimir drag in fluctuating classical fields / V. Démery, D. S. Dean // Phys. Rev. E. — 2011. — Vol. 84. — P. 010103.
82. *Bartolo D.* Fluctuations of Fluctuation-Induced Casimir-Like Forces / D. Bartolo, A. Ajdari, J.-B. Fournier, R. Golestanian // Phys. Rev. Lett. — 2002. — Vol. 89. — P. 230601.
83. *Krech M.* Fluctuation-induced forces in critical fluids / M. Krech // J. Phys.: Condens. Matter. — 1999. — Vol. 11. — P. R391.
84. *Buzzaccaro S.* Critical depletion / S. Buzzaccaro, J. Colombo, A. Parola, R. Piazza // Phys. Rev. Lett. — 2010. — Vol. 105. — P. 198301.
85. *Piazza R.* When depletion goes critical / R. Piazza, S. Buzzaccaro, J. Colombo, A. Parola // J. Phys.: Condens. Matter. — 2011. — Vol. 23. — P. 194114.
86. *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики / Василий Сергеевич Владимиров. — изд. 4-е. — М.: Наука, 1981. — 512 с.
87. *Mayergoyz I. D.* Electrostatic (plasmon) resonances in nanoparticles / Isaak D. Mayergoyz, Donald R. Fredkin, Zhenyu Zhang // Phys. Rev. B. — 2005. — Vol. 72. — P. 155412.

88. *Тозони О. В., Маергойз И. Д.* Расчет трехмерных электромагнитных полей. — Киев: Техніка, 1974. — 352 с.

89. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовиц, И. Стиган / Пер. с англ. — М.: Наука, 1979. — 832 с. [Handbook of Mathematical Functions / Edited by M. Abramowitz, I. Stegun. — N.-Y.: National Bureau of Standards, 1964.]

90. *Kompaneets R.* Interparticle Attraction in 2D Complex Plasmas / Roman Kompaneets, Gregor E. Morfill, Alexei V. Ivlev // Phys. Rev. Lett. — 2016. — Vol. 116. — P. 125001.

91. *Schwabe M.* Nonlinear waves externally excited in a complex plasma under microgravity conditions / Mierk Schwabe, Sergey K. Zhdanov, Hubertus M. Thomas, Alexei V. Ivlev, Milenko Rubin-Zuzic, Gregor E. Morfill, Vladimir I. Molotkov, Andrey M. Lipaev, Vladimir E. Fortov, Thomas Reiter // New Journal of Physics. — 2008. — Vol. 10, № 3. — P. 033037.

92. *Jaiswal S.* Experimental investigation of dynamical structures formed due to a complex plasma flowing past an obstacle / S. Jaiswal, M. Schwabe, A. Sen, P. Bandyopadhyay // Physics of Plasmas. — 2018. — Vol. 25, № 9. — P. 093703.

93. *Chumak A. A.* Theoretical description of adatom migration in two-dimensional highly-ordered states / A. A. Chumak, C. Uebing // Eur. Phys. J. B. — 1999. — Vol. 9. — P. 323.

94. *Неппер Д.* Стабилизация коллоидных дисперсий полимерами: Пер. с англ. — М.: Мир, 1986. — 487 с.

95. *Likos C. N.* Effective interactions in soft condensed matter physics / Christos N. Likos // Phys. Rep. — 2001. — Vol. 348. — P. 267.

96. *Gouyet J.-F.* Description of far-from-equilibrium processes by mean-field lattice gas models / J.-F. Gouyet, M. Plapp, W. Dieterich, and P. Maass // Adv. Phys. — 2003. — Vol. 52. — P. 523.

97. *Lev B. I.* Interaction of foreign macrodroplets in a nematic liquid crystal and induced supermolecular structures / B. I. Lev, P. M. Tomchuk // Phys. Rev. E. — 1999. — Vol. 59. — P. 591.
98. *Лев Б. І., Товкач О. М., Чернишук С. Б.* Рідкокристалічні колоїди: деякі аспекти теорії. — Київ: Наукова Думка, 2018. — 365 с.
99. *Климонтович Ю. Л.* Кинетическая теория электромагнитных процессов / Юрий Львович Климонтович. — Москва: Наука, 1980. — 377 с.
100. *Собельман И. И.* К теории рассеяния света в газах / Игорь Ильич Собельман // УФН. — 2002. — Т. 172. — С. 85–90.
101. *Stockman M. I.* A fluctuating fractal nanoworld / Mark I. Stockman // Physics. — 2010. — Vol. 3. — P. 90.
102. *v. Smoluchowski M.* Molekular-kinetische Theorie der Opaleszenz von Gasen im kritischen Zustande, sowie einiger verwandter Erscheinungen / M. von Smoluchowski // Ann. Phys. — 1908. — Vol. 330. — P. 205–226.
103. *Климонтович Ю. Л.* Влияние взаимодействия между молекулами на торможение излучением в классической теории дисперсии света / Юрий Львович Климонтович, Василий Степанович Фурсов // ЖЭТФ. — 1949. — Т. 19, № 9. — С. 819.
104. *Alekseev V. A.* Macroscopic approach to effects of radiative interaction of atoms and molecules / V. A. Alekseev, A. V. Vinogradov, I. I. Sobel'man // Sov. Phys. Usp. — 1971. — Vol. 13. — P. 576.
105. *Stockman M. I.* Localization versus Delocalization of Surface Plasmons in Nanosystems: Can One State Have Both Characteristics? / Mark I. Stockman, Sergey V. Faleev, David J. Bergman // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Vol. 87. — P. 167401.
106. *Sarychev A. K.* Percolation-enhanced nonlinear scattering from metal-dielectric composites / A. K. Sarychev, V. A. Shubin, V. M. Shalaev // Phys. Rev. E. — 1999. — Vol. 59. — P. 7239.

107. *Gel'fand B. E.* Investigation of the special characteristics of the propagation and reflection of pressure waves in a porous medium / B. E. Gel'fand, S. A. Gubin, S. M. Kogarko, O. E. Popov // J. Appl. Mech. Tech. Phys. — 1975. — Vol. 16. — P. 897.

108. *Gel'fand B. E.* Interaction of shock waves in air with a porous screen / B. E. Gel'fand, A. V. Gubanov, E. I. Timofeev // Fluid Dyn. — 1983. — Vol. 18. — P. 561.

109. *Бак П.* Как работает природа. Теория самоорганизованной критичности / Пер Бак. — М.: УРСС: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2013. — 276 с.

110. *Russel W. B., Saville D. A., Schowalter W. R.* Colloidal Dispersions. — New York: Cambridge University Press, 1991. — 525 p.

111. *Alder B. J.* Decay of the velocity autocorrelation function / B. J. Alder, T. E. Wainwright / Phys. Rev. A. — 1970. — Vol. 1, № 1, P. 18.

112. *Pagonabarraga I.* Short-time dynamics of colloidal suspensions in confined geometries / I. Pagonabarraga, M. H. J. Hagen, C. P. Lowe, D. Frenkel // Phys. Rev. E. — 1999. — Vol. 59, № 4. — P. 4458.

113. *Hagen M. H. J.* Algebraic decay of velocity fluctuations in a confined fluid / M. H. J. Hagen, I. Pagonabarraga, C. P. Lowe, D. Frenkel // Phys. Rev. Lett. — 1999. — Vol. 78, № 19. — P. 3785.

114. *Zweiback J.* Nuclear Fusion Driven by Coulomb Explosions of Large Deuterium Clusters / J. Zweiback, R. A. Smith, T. E. Cowan, G. Hays, K. B. Wharton, V. P. Yanovsky, T. Ditmire // Phys. Rev. Lett. — 2000. — Vol. 84. — P. 2634.

115. *Li H.* Coulomb explosion of hydrogen clusters irradiated by an ultrashort intense laser pulse / H. Li, J. Liu, C. Wang, G. Ni, R. Li, Z. Xu // Phys. Rev. A. — 2006. — Vol. 74. — P. 023201.

116. *Isichenko M. B.* Percolation, statistical topography, and transport in random media. — Rev. Mod. Phys. — 1992. — Vol. 64. — P. 961.

117. *Sahimi M.* Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing. — Rev. Mod. Phys. — 1993. — Vol. 65. — P. 1393.
118. *Argyrakis P.* Mass transport in an ordered three-dimensional lattice-gas system / P. Argyrakis, A. A. Chumak // Phys. Rev. B. — 2002. — Vol. 66, P. 054303.
119. *Höpfel R. A.* Negative absolute mobility of minority electrons in GaAs quantum wells / R. A. Höpfel, J. Shah, P. A. Wolff, A. C. Gossard // Phys. Rev. Lett. — 1986. — Vol. 56. — P. 2736.
120. *Mangioni S. E.* Transition from anomalous to normal hysteresis in a system of coupled Brownian motors: A mean-field approach / S. E. Mangioni, R. R. Deza, H. S. Wio // Phys. Rev. E. — 2001. — Vol. 63. — P. 041115.
121. *Cleuren B.* Ising model for a Brownian donkey / B. Cleuren, C. Van den Broeck // Europhys. Lett. — 2001. — Vol. 54. — P. 1.
122. *Buceta J.* Negative resistance and anomalous hysteresis in a collective molecular motor / J. Buceta, J. M. Parrondo, C. Van den Broeck, F. J. de la Rubia // Phys. Rev. E. — 2000 . Vol. 61. — P. 6287.
123. *Eichhorn R.* Absolute negative mobility and current reversals of a meanderingBrownian particle / R. Eichhorn, P. Reimann, P. Hänggi // Physica A. — 2003. — Vol. 325. — P. 101.
124. *Eichhorn R.* Brownian Motion Exhibiting Absolute Negative Mobility / R. Eichhorn, P. Reimann, P. Hänggi // Phys. Rev. Lett. — 2002. — Vol. 88. — P. 190601.
125. *Eichhorn R.* Paradoxical motion of a single Brownian particle: Absolute negative mobility / R. Eichhorn, P. Reimann, P. Hänggi // Phys. Rev. E. — 2002. — Vol. 66. — 066132.
126. *Lifshitz I. M.* The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions / I. M. Lifshitz, V. V. Slyozov // J. Phys. Chem. Solids. — 1961. — Vol. 19. — P. 35.

127. *Cleuren B.* Random walks with absolute negative mobility / B. Cleuren, C. Van den Broeck // Phys. Rev. E. — 2002. — Vol. 65. — P. 030101(R).

128. *Panja D.* Effects of fluctuations on propagating fronts / Debabrata Panja // Phys. Rep. — 2004. — Vol. 393. — P. 87.

Додаток А

Індукована дисипативна взаємодія між точковими домішками

В цьому додатку приведено грубу оцінку *wake-mediated* взаємодії між далеко рознесеними у просторі маленькими включеннями, які знаходяться в потоці газу. Розглянемо задачу нерівноважного стаціонарного стану в довгохвильовому наближенні, рівняння (2.11):

$$\nabla^2 n - U\nabla^2 n + n\nabla^2 U - (\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\nabla})n(1-n-U) = 0, \qquad \text{(A.1)}$$

де включення задані розподілом U «важкої» компоненти газу. Для простоти, розглядатимемо гладкий розподіл $U(\mathbf{r}) = \sum_k u(\mathbf{r}-\mathbf{R}_k)$, де розподіл $u(\mathbf{r}-\mathbf{R}_k)$ описує k-те включення і має компактний носій зцентрований в положенні $\mathbf{R}_k$. Для рознесених включень будемо вважати, що $\int u(\mathbf{r}-\mathbf{R}_k)u(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)\,\mathrm{d}\mathbf{r} \approx 0$.

Для далеко рознесених маленьких включень (чиї розміри порівнянні зі сталою ґратки) міжчастинкова взаємодія в газі є менш суттєвою і дрейфовий доданок в рівнянні (А.1) можна записати в лінійному наближенні, див. Розділ 1. Припустивши, що розподіл $n = n_0 + \delta n$ слабо відхиляється від рівноважного значення n_0, лінеаризуємо дрейфовий доданок в рівнянні (А.1), $n^2 \approx n_0^2 + 2n_0\delta n$, і перепишемо рівняння в наступному вигляді:

$$\nabla^2\delta n - 2(\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\nabla})\delta n = U\nabla^2\delta n - (n_0+\delta n)\nabla^2 U - (\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\nabla})(n_0+\delta n)U, \quad \text{(A.2)}$$

де $\mathbf{q} = (1/2 - n_0)\mathbf{g}$. На основі рівняння (А.2) оцінимо асимптотичну поведінку дисипативної взаємодії між включеннями в залежності від їх віддаленості, взаємного розташування та рівноважної концентрації газу n_0. Для цього скористаємось якісним підходом, який дозволить отримати прості аналітичні вирази для збурення густини та дисипативних сил.

Тут буде зручно працювати з інтегральним представленням рівняння (A.1), використавши функцію Ґріна $G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ рівняння

$$\nabla^2_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - 2(\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}})G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{A.3}$$

Ця Ґрінова функція за формою подібна до анізотропного екранованого кулонівського потенціалу

$$G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{e^{-q|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|+\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{A.4}$$

у тривимірному випадку та

$$G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi}e^{\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}K_0(q|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) \tag{A.5}$$

у двовимірному. Використавши (A.3) можемо переписати рівняння для збурення густини δn у вигляді

$$\delta n(\mathbf{r}) = [n_0 + \delta n(\mathbf{r})]U(\mathbf{r}) + \int U(\mathbf{r}')\left(\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{r}')\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}\right)G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\mathrm{d}\mathbf{r}', \tag{A.6}$$

де

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{r}) = 2\mathbf{g}(1-n_0)[n_0+\delta n(\mathbf{r})] - 2\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}\delta n(\mathbf{r}). \tag{A.7}$$

Рівняння (A.6) можна спростити застосувавши метод подібний до підходу самоузгодженого молекулярного поля [58, 97]. Оскільки розподіл U важкої компоненти локалізований поблизу центрів включень $\mathbf{R}_j$ і має компактний носій $u_j(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j) \leqslant 1$, то можна розглядати $u_j(\mathbf{r})$ як розподіл густини ймовірності, а інтеграл в (A.6) як середнє $\overline{(\boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{\nabla}G)}_j$ пов'язане з цим розподілом. Тут, $\overline{(\ldots)}_j = A_j^{-1}\int(\ldots)u(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)\,\mathrm{d}\mathbf{r}$, де константа нормування $A_j = \int u(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)\,\mathrm{d}\mathbf{r}$ формально відповідає об'єму домішки.[1] Тоді, користуючись наближенням середнього поля, $\overline{(\mathbf{\Omega}\cdot\mathbf{\nabla}G)}_j \approx \left(\overline{\mathbf{\Omega}}_j\cdot\overline{\mathbf{\nabla}G_j}\right) \approx \left(\overline{\mathbf{\Omega}}_j\cdot\mathbf{\nabla}G(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)\right)$, рівняння (A.6) можна записати як

$$\delta n(\mathbf{r}) \approx [n_0+\delta n(\mathbf{r})]U(\mathbf{r}) + \sum_j \left(\overline{\mathbf{\Omega}(\mathbf{R}_j)}\cdot\mathbf{\nabla}_\mathbf{r}\right) G(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j), \tag{A.8}$$

де

$$\overline{\mathbf{\Omega}(\mathbf{R}_j)} = 2\mathbf{g}(1-n_0)\left[n_0+\overline{\delta n_j}\right] - 2\overline{\mathbf{\nabla}\delta n_j} \tag{A.9}$$

відіграє роль молекулярного поля або середнього потоку в системі, а самі ці величини визначаються зовнішнім полем $\mathbf{g}$ та полем збурення густини, породженим рештою включень. Рівняння на константи $\overline{\delta n_j}$ та $\overline{\mathbf{\nabla}\delta n_j}$ можна отримати самоузгоджено використовуючи рівняння (A.8).

Представлення (A.7) дозволяє якісно оцінити асимптотичну поведінку збурення густини газу на великих відстанях від одинокого включення та асимптотичну поведінку дисипативної сили між далеко рознесеними включеннями. Використовуючи (A.4), збурення густини газу (A.8) далеко від одинокого включення можна записати як

$$\delta n(\mathbf{r}) \sim \left(\overline{\mathbf{\Omega}}\cdot\mathbf{\nabla}_\mathbf{r}\right) G(\mathbf{r}), \tag{A.10}$$

тобто

$$\delta n(\mathbf{r}) \sim \left(\overline{\mathbf{\Omega}}\cdot\mathbf{\nabla}_\mathbf{r}\right) \frac{e^{-q|\mathbf{r}|+\mathbf{qr}}}{|\mathbf{r}|} \tag{A.11}$$

у тривимірному випадку та

$$\delta n(\mathbf{r}) \sim \left(\overline{\mathbf{\Omega}}\cdot\mathbf{\nabla}_\mathbf{r}\right) \frac{e^{-q|\mathbf{r}|+\mathbf{qr}}}{|\mathbf{r}|^{-1/2}} \tag{A.12}$$

---

[1] В подальшому константу нормування буде опущено, оскільки об'єм точкової домішки $\sim \ell^3 \sim 1$. Розподіл густини газу $n(\mathbf{r})$ також можна описувати збуренням δn неоднорідного рівноважного розподілу газу з включеннями $n(\mathbf{r}) \approx n_0[1-U(\mathbf{r})]+\delta n(\mathbf{r})$, а не однорідної концентрації вільного від включень газу n_0, рівняння (A.2). Оскільки рівняння для $\delta n(\mathbf{r})$ і $\Omega(\mathbf{r})$ виявляються подібними до (A.6) та (A.7), отримані якісні результати зберігаються.

у двовимірному. В останньому виразі було використано асимптотику функції Бесселя $K_0(q|\mathbf{r}|) \sim |\mathbf{r}|^{-1/2}e^{-q|\mathbf{r}|}$ при великих значеннях r. За низької концентрації газу ($n_0 < 1/2$) щільна область перед включенням описується експоненційною асимптотикою, в той час як асимптотика збідненої області перед включенням є степеневою. При підвищенні концентрації газу — коли n_0 стає більшим $1/2$ — вектор $\mathbf{q} = (1/2 - n_0)\mathbf{g}$ змінює свій напрям. Це свідчить про те, що перемикання направленості сліду відбувається одночасно з відповідним перемиканням між експоненційною і степеневою асимптотиками. При $n_0 = 1/2$ маємо $\mathbf{q} = 0$, тому асимптотика збурення δn відповідає «дипольній» поляризації збурення газу навколо включення.

На k-те включення діє сила $\boldsymbol{f}_k = \int \delta n(\mathbf{r})\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}u(\mathbf{r}-\mathbf{R}_k)\,\mathrm{d}\mathbf{r} \sim -\overline{\boldsymbol{\nabla}\delta n}_k$. Для малих (точкових) включень силу, зумовлену дією j-го включення на k-те, можна грубо оцінити як

$$\boldsymbol{f}_{kj} \sim -\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}_k}\left(\overline{\boldsymbol{\Omega}}_j \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}_k}\right) G(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j), \tag{A.13}$$

тобто

$$\boldsymbol{f}_{kj} \sim -\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}_k}\left(\overline{\boldsymbol{\Omega}}_j \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}_k}\right) \frac{e^{-q|\mathbf{R}_k-\mathbf{R}_j|+\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_k-\mathbf{R}_j)}}{|\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j|} \tag{A.14}$$

у тривимірному випадку

$$\boldsymbol{f}_{kj} \sim -\nabla_{\mathbf{R}_k}\left(\overline{\boldsymbol{\Omega}}_j, \nabla_{\mathbf{R}_k}\right) \frac{e^{-q|\mathbf{R}_k-\mathbf{R}_j|+\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_k-\mathbf{R}_j)}}{|\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j|^{-1/2}}, \tag{A.15}$$

у двовимірному. Як видно з рівнянь (A.10) та (A.13), локальне збурення густини навколо включення сформоване ефективним потоком $\overline{\boldsymbol{\Omega}}$ (молекулярне поле), який визначається зовнішнім полем, та потоками індукованими збуреннями густини газу від усіх включень.

Додаток Б
Залежності від змінних потоку в задачі розсіяння

Метою Розділу 3, в першу чергу, було показати принципову можливість деякий ефектів колективного розсіяння, які сильно залежать від просторової структури кластерів домішок. Однак, властивості розсіяння, зумовлені ефектом блокади в газі, визначаються не лише структурою кластерів але також параметрами потоку газу, такими як концентрація газу n_0 та величина зовнішнього поля $\mathbf{g}$ (або рушійної сили $\mathbf{G}$).

Дійсно, в кінетичному рівнянні для середніх чисел заповнення вузлів ґратки дрейфовий додано, обумовлений наявністю зовнішнього поля, відповідає за колективний ефект блокади. Цей доданок, в наближенні середнього поля, має вигляд

$$-\delta\nu[(n_0+\delta n_{k,i})\,(u_{k,i+1}-u_{k,i-1}+2\delta n_{k,i+1}-2\delta n_{k,i-1})-\\ -(1-u_{k,i})\,(\delta n_{k,i+1}-\delta n_{k,i-1})],$$

де $\langle n_{k,i}(t)\rangle = n_0+\delta n_{k,i}(t)$ — середнє число заповнення вузла (k,i), n_0 — середня концентрація газу, $u_{k,i}$ — розподіл домішок ($u=1$ для окупованого домішкою вузла та $u=0$ для вільного вузла) і $\delta\nu=\nu G\ell/(2kT)$. Зовнішня сила $\mathbf{G}$ направлена вздовж координати, позначеної індексом i.

В Розділі 3 виклад зосереджено на залежності колективного ефекту блокади від просторового розподілу домішок у кластері $u_{k,i}$ і від ступеню безладу в цьому розподілі. Ці результати отримано, в основному, при значеннях величин зовнішнього поля $\mathbf{g}$ і концентрації n_0 підібраних таким чином, щоб виражено проявлялась нелінійна поведінка. В цьому Додатку приводяться додаткові дані для широкого інтервалу значень параметрів потоку n_0 і g, а також деякі інші важливі параметричні залежності. Для того щоб кількісно охарактеризувати представлені в Розділі 3 ефекти ми використовували як інтегральні характеристики — повну силу тертя $\boldsymbol{f}$ і повну дисперсію ε, так і локальні — швидкість руху фронту ударної хвилі v_f.

Параметричні залежності. Розглянемо як змінні потоку впливають на поведінку швидкості v_f центральної області ударної хвилі, тобто швидкості центрального профілю $\langle n(x_i, y_i)\rangle|_{y_i=0}$. Рисунок Б.1 показує часову залежність швидкості для ударної хвилі, що поширюється перед випадковим

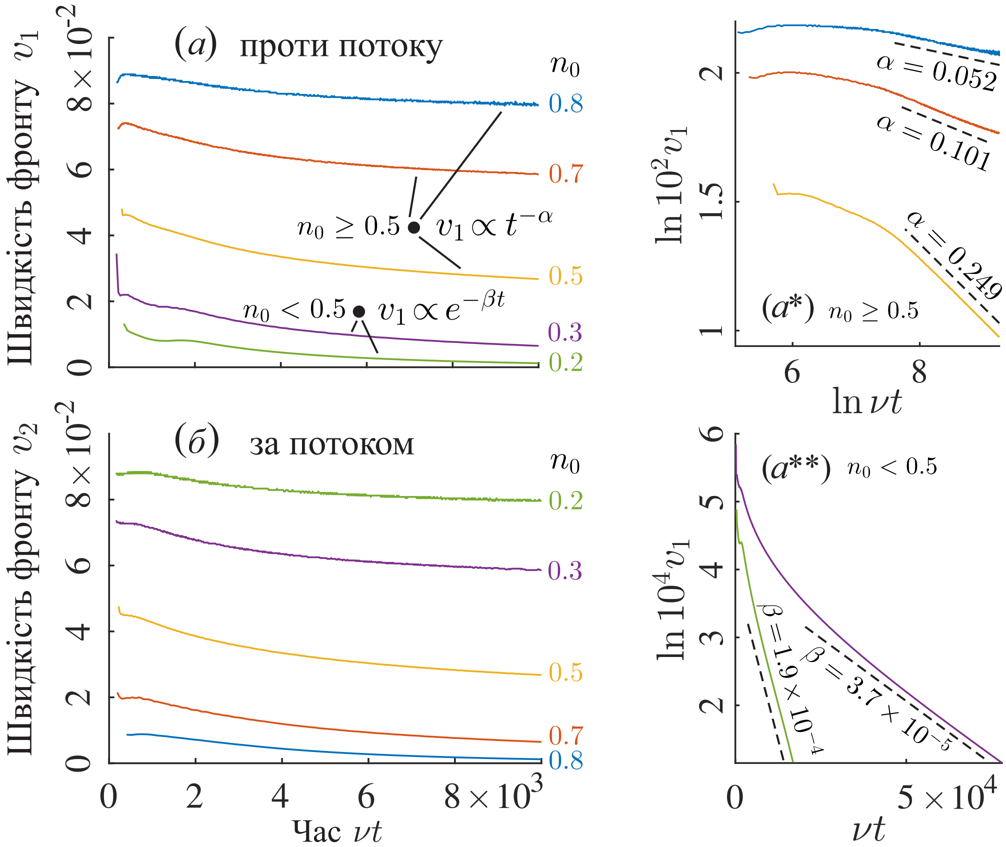


Рис. Б.1. Часозалежна поведінка швидкості руху фронту ударної хвилі, (a) v_1 — перед кластером і $(б)$ v_2 — позаду нього, при різних значеннях концентрації газу n_0 (вказано справа біля кожного графіка). (a^*) — це білогарифмічний графік тих залежностей з (a) для яких $n_0 \geqslant 0.5$. На (a^{**}) показані у напівлогарифмічному масштабі ті залежності з (a) для яких $n_0 < 0.5$. Штрихові прямі вказують на відповідну степеневу чи експоненційну поведінку залежностей, а поруч з ними вказані значення показників (α чи β). Випадкова реалізація кластера домішок ідентична тій, що приведена на Рис. 3.1$б$ в пункті 3.2 ($N = 362$, $R = 20\ell$). $v_{1(2)}$ наведено в одиницях $\ell/(\nu t)$.

кластером [$v_1(t)$, Рис. Б.1*а*] та позаду нього [$v_2(t)$, Рис. Б.1*б*] при різних значеннях концентрації газу n_0 ($0 < n_0 < 1$). Загалом, збільшення концентрації n_0 призводить до збільшення швидкості руху фронту v_1, див. Рис. Б.1*а*, в той час як для v_2 ефект прямо протилежний, як це видно з Рис. Б.1*б*. Крім того, перехід з області $n_0 < 0.5$ до $n_0 > 0.5$ супроводжується суттєвою зміною асимптотичної поведінки. Ударні хвилі що рухаються проти потоку при $n_0 < 0.5$, так само як і ті що рухаються за потоком при $n_0 > 0.5$, зазнають ефекту зупинки. Перед самою зупинкою ударної хвилі її швидкість згасає практично експоненційно, $v \propto e^{-\beta t}$, де показник β (див. Рис. Б.1*а***) істотно залежить від концентрації газу, так що $\beta \propto \beta(n_0)$. Якщо ж фронт хвилі рухається неперервно (ефект зупинки відсутній), асимптотична поведінка його швидкості наближено описується степеневим законом, $v \propto t^{-\alpha}$, де показник степені α є також чутливим до параметру n_0 як це видно з прикладів асимптотик показаних на Рис. Б.1*а**, тому $\alpha = \alpha(n_0)$.

Властивість інверсії. Легко помітити, що асимптотична поведінка v_1 на великих часах (включно з ефектом зупинки) для кожного значення n_0 аналогічна поведінці v_2 при значеннях концентрації $1 - n_0$. Ця закономірність відображає ефект концентраційної інверсії сліду (Розділ 1).

Залежність швидкості руху фронту ударної хвилі v_1 від величини зовнішнього поля $\mathbf{g}$ показана на Рис. Б.2 для двох значень n_0, одне з яких вибране в інтервалі $n_0 < 0.5$ (Рис. Б.2*а*), а інше — $n_0 < 0.5$ (Рис. Б.2*б*). У першому випадку динаміка сповільнення на великих часах характеризується експоненційним загасанням швидкості руху фронту до повної його зупинки, $v_1 = 0$, в той час як у другому випадку загасання приблизно відповідає степеневій залежності. В останній, показник степеня $\alpha < 1$ залишається практично незмінним при посиленні амплітуди зовнішнього поля, див. Рис. Б.2*б**. У випадку експоненційного загасання, Рис. Б.2*а**, спостерігається лиш незначне зменшення значення показника β.

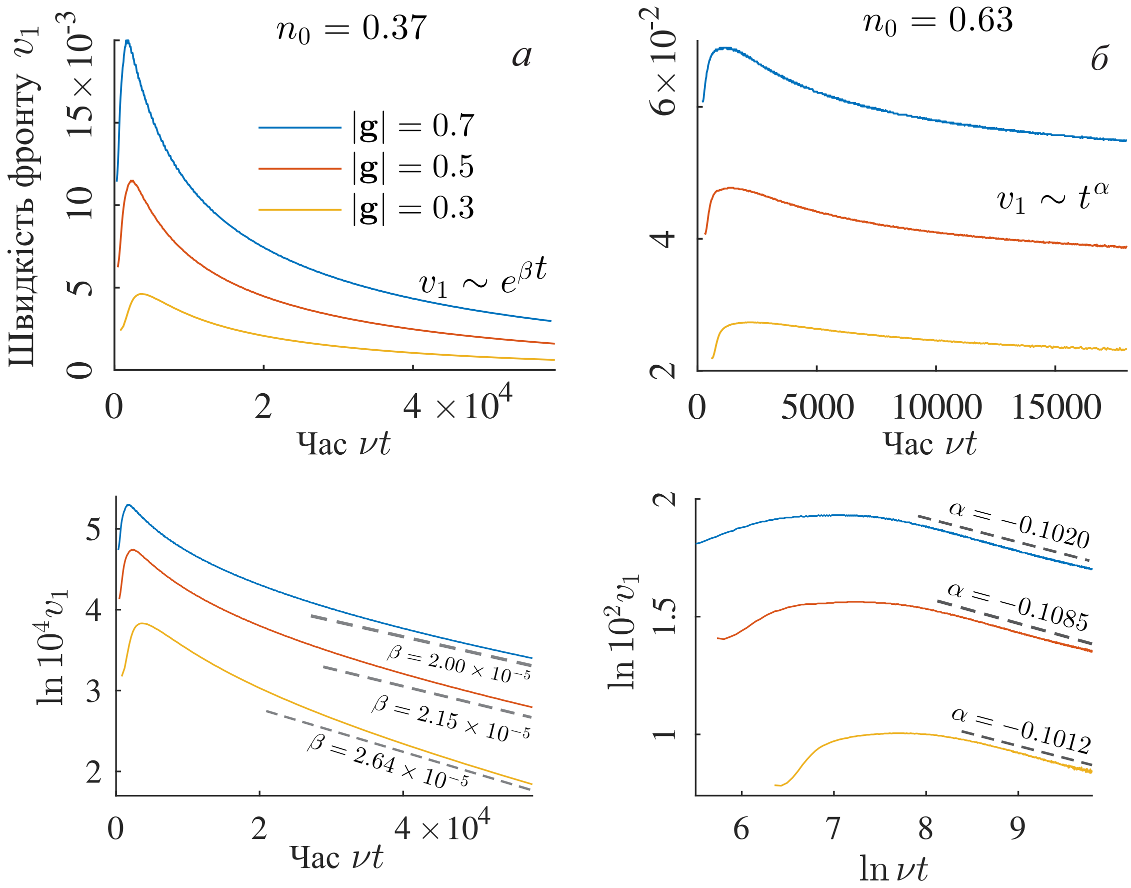


Рис. Б.2. Підсилення швидкості фронту ударної хвилі v_1 (перед кластером) при збільшенні величини зовнішнього поля $|\mathbf{g}|$, для випадків *а*) $n_0 = 0.37$ та *б*) $n_0 = 0.63$. Під кожним з цих графіків приведено відповідні залежності у подвійному та напівлогарифмічному масштабах і вказані приблизні асимптотики. Використана тут випадкова просторова реалізація кластера домішок ідентична тій, що приведена на Рис. 3.1*в* в основному тексті роботи (з $N = 362$ та $R = 40\ell$). v_1 наведено в одиницях $\ell/(\nu t)$.

Сила на випадковий кластер домішок при різних значеннях концентрації газу n_0 показана на Рис. Б.3. Типово, $f(t)$ має пікове підсилення на початкових часах і досить швидко приходить до свого стаціонарного значення $f(t \to \infty)$. В свою чергу, стаціонарні значення $f(n_0)$ лежать на кривій, що має вигляд приплюснутого горба майже симетричної форми, що знову ж таки пов'язано зі властивістю концентраційної інверсії сліду (Розділ 1), див. внутрішній графік на Рис. Б.3. Область характерного плато на цій кривій відображає режим інтенсивного екранування потоку та ефективного обтікання кластера.

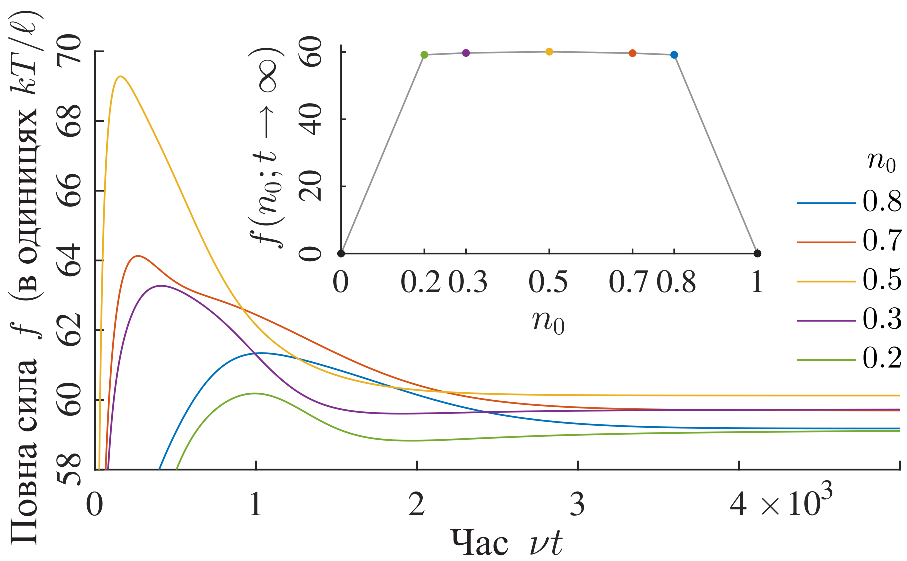


Рис. Б.3. Повна сила $f = |\boldsymbol{f}|$, що діє на кластер домішок, як функція часу при різних значеннях концентрації n_0. Внутрішній графік: стаціонарні значення сили f в усьому інтервалі значень концентрації n_0. Використана тут випадкова просторова реалізація кластера домішок ідентична тій, що приведена на Рис. 3.1*б* в основному тексті роботи (з $N = 362$ та $R = 20\ell$).

Вплив величини зовнішнього поля на повну силу тертя показано, для стаціонарного випадку, на Рис. Б.4. Як видно, вихід сили на насичення при збільшенні амплітуди зовнішнього поля $|\mathbf{g}|$ загалом має степеневий характер $\sim A|\mathbf{g}|^\alpha$, де $\alpha \lesssim 1$. Як показано на внутрішньому графіку Рис. Б.4, показник степеня α слабо залежить від n_0, тобто асимптотична поведінка приблизно однакова при різник значеннях концентрації, в той час як «амплітуда» $A = A(n_0)$ є немонотонною функцією від n_0.

Збільшення концентрації n_0 також призводить до підсилення розсіяння, для кількісної характеристики якого використовується повна дисперсія ε, див. Рис. Б.5. Слід зазначити, що в окремому випадку $n_0 = 0.5$ насичення з часом величини $\sqrt{\varepsilon}$ відбувається згідно степеневого закону $\propto t^\alpha$ ($\alpha < 1$), див. Рис. Б.5*б*. Більше того, така асимптотична поведінка зберігається при різній величині зовнішнього поля $|\mathbf{g}|$, а значення самого показника степеня α змінюється не суттєво, див. Рис. Б.6*б*.

В загальному підсумку: в інтервалі концентрації $n_0 < 0.5$ збільшення

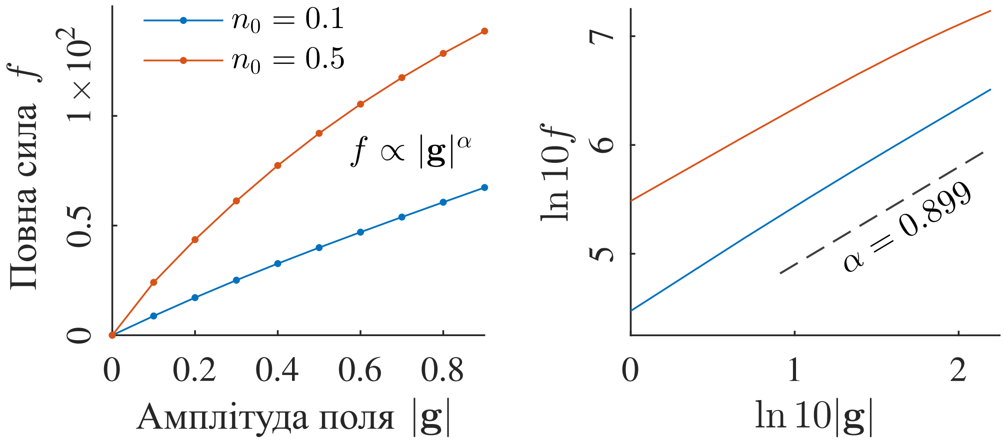


Рис. Б.4. Повна сила тертя, що діє на випадково неоднорідний кластер в стаціонарному стані. Зліва: Повна сила $f \equiv |\boldsymbol{f}|$ (в одиницях kT/ℓ) в залежності від величини поля $|\mathbf{g}|$ для двох різних значень концентрації n_0. Справа: Відповідний білогарифмічний графік демонструє типову асимптотичну поведінку. Використана тут випадкова просторова реалізація кластера домішок ідентична тій, що приведена на Рис. 3.1*в* в основному тексті роботи (з $N = 362$ та $R = 40\ell$).

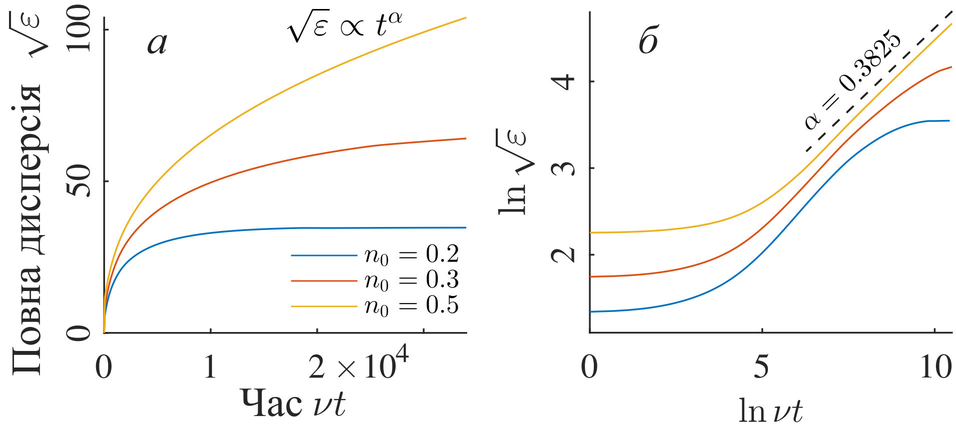


Рис. Б.5. *а*) Часова залежність повної дисперсії $\sqrt{\varepsilon}$ при різних значеннях концентрації газу n_0, $|\mathbf{g}| = 0.5$. *б*) Відповідний білогарифмічний графік демонструє типову асимптотичну поведінку. Використана тут випадкова просторова реалізація кластера домішок ідентична тій, що приведена на Рис. 3.1*в* в основному тексті роботи (з $N = 362$ та $R = 40\ell$).

величин n_0 та/чи $\mathbf{G}$ призводить до підсилення і розсіяння і ударної хвилі, проте не вносить суттєвих змін в якісну картину розсіяння.

Динаміка фронту. Як згадувалось в основному тексті, положення фронту ударної хвилі визначалось вузлом ґратки x_f для якого друга по-

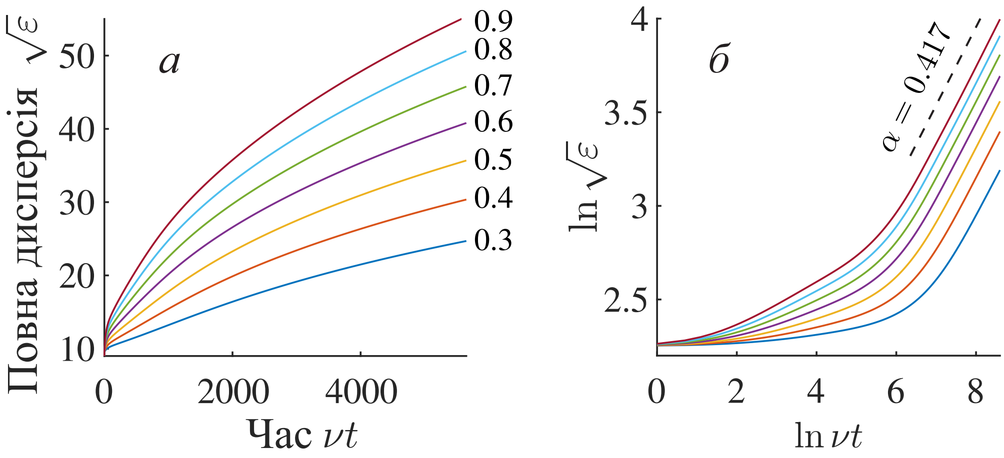
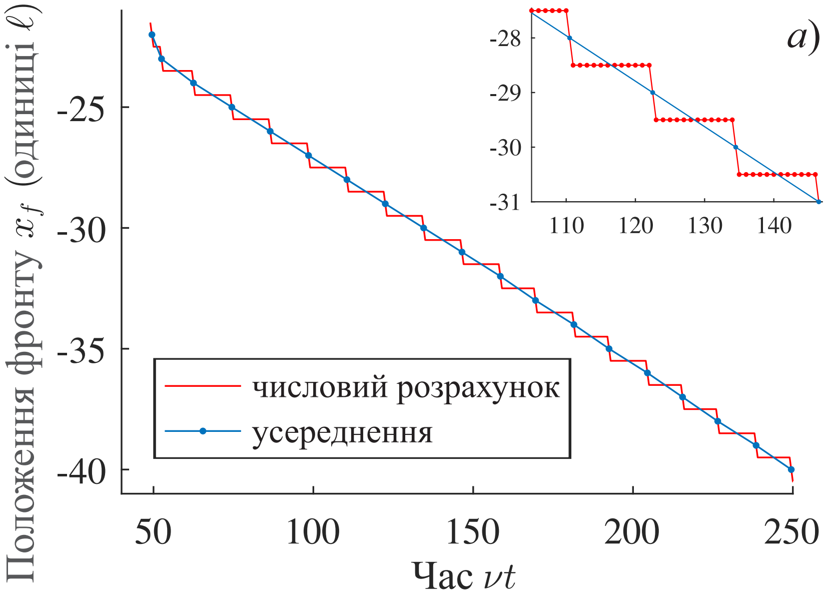


Рис. Б.6. *а*) Часова залежність повної дисперсії $\sqrt{\varepsilon}$ при різних значеннях амплітуди зовнішнього поля $|\mathbf{g}|$ (їх вказано біля кожної кривої), $n_0 = 0.5$. *б*) Відповідний білогарифмічний графік демонструє типову асимптотичну поведінку. Використана тут випадкова просторова реалізація кластера домішок ідентична тій, що приведена на Рис. 3.1*в* в основному тексті роботи (з $N = 362$ та $R = 40\ell$).

хідна від $\langle n(x_i, y_i)\rangle|_{y_i=0}$ (скінченнорізницева похідна на ґратці) дорівнює нулю. Відтак, x_f може набувати лише дискретних значень вздовж лінії центрального профілю густини. Також, в рамках такого підходу, часова залежність $x_f(t)$, так само як і $v_f(t)$, не є гладкою і відображає властиву системі просторову дискретність. Зокрема, рух фронту демонструє «сходинкову» поведінку, як показано на Рис. Б.7*а*. Така поведінка часто зустрічається в просторово дискретних системах, наприклад, послідовне долання бар'єрів при дифузійному транспорті в сильнонеоднорідних середовищах (див. пункт 4.2 та [49]) або так звана «halt-and-go» динаміка фронтів, зумовлена наявністю ґратки та ефектами скінченного розміру частинок [128]. Для того щоб належним чином розрахувати $v_f(t)$ (як скінченнорізницеву похідну) отримані негладкі залежності $x_f(t)$ потребують застосування певної процедури регуляризації, тому їх було замінено на «гладкі» відтинково лінійні функції, що дають усереднену поведінку як показано на Рис. Б.7*а*. Відзначимо, що розраховані чисельно функції $v_f(t)$ також можуть бути негладкими і з дрібномасштабними квазіперіодичними осциляціями, як показано на Рис. Б.7*б*. Згладжену апроксимаційну криву можна грубо отримати, наприклад, просто використавши центральні різниці, визначені на наступних сусідніх вузлах $v_f(t_i) \approx [x_f(t_{i+k\ell}) - x_f(t_{i-k\ell})]/\Delta t$: чим більше значення



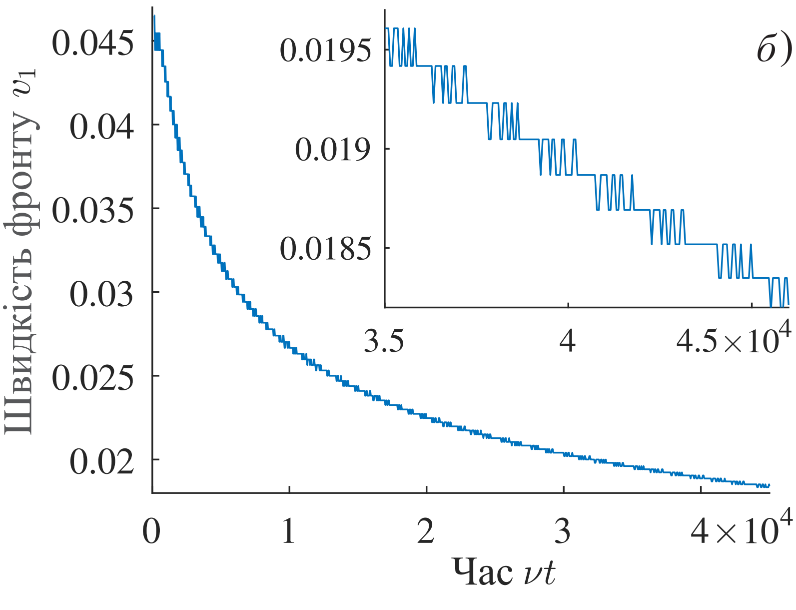


Рис. Б.7. *а*) *Регуляризація* $x_f(t)$. Часова залежність положення фронту x_f ударної хвилі, що рухається проти потоку при концентрації газу $n_0 = 0.8$. *б*) Часова залежність швидкості руху фронту v_1 ударної хвилі (в одиницях $\ell/\nu t$), що теж рухається проти потоку при концентрації газу $n_0 = 0.5$. Використана тут випадкова просторова реалізація кластера домішок ідентична тій, що приведена на Рис. 3.1*б* в основному тексті роботи (з $N = 362$ та $R = 20\ell$). Амплітуда зовнішнього поля $|\mathbf{g}| = 0.5$.

$k = 1, 2, \ldots$, тим більш гладкою буде залежність.

Додаток В

Список публікацій здобувача за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації

Список публікацій. Результати дисертаційної роботи представлено у 10-и роботах, що опубліковані у провідних фізичних журналах [1–5], та як тези конференцій [6–10].

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. Spec. Top. — 2013. — Vol. 216. — P. 127.
3. *Клюшниченко А. В.* Эффект блокады и концентрационное переключение «направления» следа включения в решеточном газе / А. В. Клюшниченко, 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. *Kliushnychenko O. V.* Induced Correlations in Multicomponent Systems

/ O. V. Kliushnychenko, S. P. Lukyanets // Book of Abstracts. III International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics (August 29 – September 2, 2011, Kharkov, Ukraine). — Kharkov: NSC KIPT, 2011. — P. 183.

7. *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.
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.

Апробація результатів дисертації. Матеріали роботи було представлено на наукових семінарах відділу теоретичної фізики Інституту фізики НАН України, відділів синергетики та теорії квантових процесів у наносистемах Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, 42-й підсумковій науковій конференції Інституту фізики НАН України (2017 р.); окремі результати доповідалися на міжнародних конференціях та симпозіумах:

- 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics (QEDSP2011), 29 August – 2 September 2011, Kharkov, Ukraine
- 4th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, 3–6 July 2012, Lviv, Ukraine
- Bogolyubov Conference Problems of Theoretical Physics, 24–26 May 2016, BITP, Kyiv, Ukraine
- 30th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, 3–8 September 2017, Kraków, Poland