де

$$P_{\alpha}^{l}(r_l^{\alpha})=\frac{3}{m_{\alpha}}k_{\text{Б}}Tf_{\alpha}^{l}(r_l^{\alpha})e-\frac{1}{2m_{\alpha}}\sum_{\beta,\lambda}\int_{V_{\lambda}}dr_{\lambda}^{\beta}e:\frac{\partial}{\partial r_l^{\alpha}}\times$$

$$\times\overline{\Phi}_{\alpha\beta}^{l\lambda}(r_l^{\alpha},r_{\lambda}^{\beta})f_{\alpha\beta}^{l\lambda}(r_l^{\alpha},r_{\lambda}^{\beta})-\frac{1}{m_{\alpha}}\sum_{s}\int_{V_2}dr_s e\frac{\partial}{\partial r_l^{\alpha}}\overline{\Phi}_{\alpha s}^{l}(r_l^{\alpha},r_s)f_{\alpha s}^{l}(r_l^{\alpha},r_s) \quad (3.24)$$

— узагальнений локальний осмотичний тиск частинок сорту α у фазі l, який згідно з (3.14), (3.10) і (3.6) входить у відповідні коефіцієнти дифузії.

Таким чином, ми розрахували нульовий і другий моменти через унарні і вищі рівноважні функції розподілу іонів і молекул розчину електроліту і молекул мембрани при зовнішньому тиску ΔP. У результаті для дослідження узагальнених коефіцієнтів дифузії іонів і молекул (3.6) виникає задача розрахунку унарних, парних і вищих рівноважних функцій розподілу іонів і молекул для трифазної системи вихідний розчин електроліту — мембрана — фільтрат. Цим питанням будуть присвячені наступні праці щодо розрахунку великої статистичної суми (2.10) методом колективних змінних [7].

1. *Куриляк І. Й., Токарчук М. В.* Статистична теорія процесів переносу розчинів електролітів крізь мембранні структури // Укр. фіз. журн.— 1991.— **36**, № 8.— С. 1179—1185.
2. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика.— М. : Наука, 1971.— 417 с.
3. *Зубарев Д. Н.* Современные методы статистической теории неравновесных процессов // Итоги науки и техники. Сер. Соврем. пробл. математики.— ВИНИТИ.— 1980.— **15**.— С. 131—226.
4. *Юхновский И. Р., Скрипка И. И.* К статистической теории диффузии в смешанной ионно-дипольной системе // Укр. фіз. журн.— 1977.— **22**, № 8.— С. 1318—1327.
5. *Токарчук М. В.* К теории вращательной диффузии в смешанных ионно-молекулярных системах.— Киев, 1983.— 15 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физ.; ИТФ-83-42Р).
6. *Токарчук М. В.* К теории временных корреляционных функций импульсов ионно-дипольных систем // Укр. фіз. журн.— 1986.— **31**, № 7.— С. 1123—1131.
7. *Юхновский И. Р., Головко М. Ф.* Статистическая теория классических равновесных систем.— К. : Наук. думка, 1980.— 372 с.

Інститут фізики конденсованих систем
АН України, Львів

Одержано 5.12.92

УДК 548:537.611.44, 536.75

І. М. МРИГЛОД, М. В. ТОКАРЧУК

УЗАГАЛЬНЕНА ГІДРОДИНАМІКА РІДКИХ МАГНЕТИКІВ

З використанням методу нерівноважного статистичного оператора Зубарєва отримані рівняння узагальненої гідродинаміки для моделі магнітної рідини, в якій рідина «підсистема» розглядається класично, а спінова — як квантова.

1. Вступ

Одним із цікавих напрямків сучасної теорії магнетизму є дослідження явища магнетизму систем, що перебувають у рідкому стані. Принципова можливість існування рідких магнетиків (експериментальні дослідження магнітних властивостей розплавів перехідних металів [1, 2]) останнім часом вважається доведеною [3].

Теоретичні дослідження термодинамічних, структурних та динамічних властивостей рідких магнетиків проводились в багатьох працях [4—14]. Серед інших досліджень слід виділити праці І. О. Вакарчука, Ю. К. Рудавського, Г. В. Понеділка [7—10], в яких була запропонована мікроскопічна теорія рідких феромагнетиків. Тут розглядалася модель рідкого магнетика, що враховує як рідинні властивості системи, так і обмінну гейзенбергівську взаємодію, яка відповідає за її магнітну поведінку. На основі цієї моделі для рідких магнетиків проведені розрахунки вільної енергії, знайдені намагніченість, рідинне рівняння стану, спектр спінових хвиль і його затухання. У працях [7, 8, 10] досліджувався вплив магнітних взаємодій на структуру рідини. Мікроскопічна теорія [7—10] була узагальнена І. О. Вакарчуком і І. Ф. Марголич на дослідження двокомпонентних рідких магнетиків [11, 12]. Динамічні властивості рідких феромагнетиків (спектр коливань, високочастотні властивості) вивчались у працях І. О. Ахієзера і І. Т. Ахієзера [13, 14] на основі феноменологічних рівнянь руху.

Важливою і малодосліджeною проблемою залишається вивчення нерівноважних властивостей рідких магнетиків. У даній статті на основі моделі, запропонованої у працях [7—10], за допомогою методу нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [15—17] отримані рівняння узагальненої гідродинаміки рідкого магнетика у зовнішньому неоднорідному магнітному полі.

2. Нерівноважна функція розподілу системи магнітних атомів у зовнішньому магнітному полі

Розглянемо систему N магнітних атомів з спіном s_j у зовнішньому неоднорідному магнітному полі $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r};t)$, яка знаходиться у рідинному стані. Гамільтоніан такої системи зобразимо у наступній формі:

$$H(t)=H_L(t)+\hat{H}_s(t), \tag{2.1}$$

де

$$H_L=\sum_{j=1}^{N}\frac{p_j^2}{2m}+\frac{1}{2}\sum_{l\neq 1}^{N}\Phi(|\boldsymbol{r}_{jl}|) \tag{2.2}$$

— класична частина гамільтоніана, що описує рідинну «підсистему» як просту класичну рідину, а

$$\hat{H}_s(t)=\hat{H}_s-\int d\boldsymbol{r}\,\hat{M}(\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r};t), \tag{2.3}$$

де

$$\hat{H}_s=-\frac{1}{2}\sum_{f,k}^{N}J(|\boldsymbol{r}_{fk}|)\,\boldsymbol{s}_f\boldsymbol{s}_k \tag{2.4}$$

— квантова частина гамільтоніана, що описує магнітну «підсистему» в неоднорідному магнітному полі $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r};t)$; $\hat{H}_s$ — гамільтоніан обмінної взаємодії магнітних атомів.

Другий доданок в правій частині (2.3) описує взаємодію спінів з зовнішнім неоднорідним магнітним полем $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r};t)$, де $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})$ — густина магнітного моменту:

$$\hat{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{r})=\sum_{f=1}^{N}\mu\boldsymbol{s}_f\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_f), \tag{2.5}$$

μ — магнітний момент окремого атома; $J(|\boldsymbol{r}_{jk})$ — обмінний інтеграл.

Нерівноважний стан такої системи описується нерівноважним статистичним оператором $\rho(x^N;t)$, який задовольняє рівняння Ліувілля:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x^N;t)+iL_N\rho(x^N;t)=0,\quad x=\{p,r,s\}, \tag{2.6}$$

де iL_N — оператор Ліувілля.

Для гамільтоніана (2.1) оператор iL_N має наступний вигляд:

$$iL_N=iL_L+i\hat{L}_s(t), \tag{2.7}$$

де

$$iL_L = \sum_{f=1}^{N} \frac{p_f}{m} \frac{\partial}{\partial r_f} - \frac{1}{2} \sum_{f \neq l}^{N} \frac{\partial}{\partial r_f} \left(\Phi(|r_{fl}|) - J(|r_{fl}|) s_f s_l\right) \left(\frac{\partial}{\partial p_f} - \frac{\partial}{\partial p_l}\right) \tag{2.8}$$

— «класична» рідинна частина, в якій у другому доданку є певний внесок від обмінного інтегралу $J(|r_{fl}|)$;

$$i\hat{L}_s(t)\mathscr{A} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_s(t), \mathscr{A}] = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_s(t)\mathscr{A} - \mathscr{A}\hat{H}_s(t)] \tag{2.9}$$

— квантова частина оператора Ліувілля.

Нерівноважний статистичний $\rho(x^N;\ t)$ нормований на одиницю:

$$\int d\Gamma_N \rho(x^N;\ t) = 1,$$

$$\int d\Gamma_N \ \ldots\ = \int \ldots \int \frac{(dr\,dp)^{N'}}{N!\,(2\pi\hbar)^{3N}} \mathrm{Sp}_{\{s_1,\ldots,s_N\}}(\ldots). \tag{2.10}$$

Для знаходження із рівняння Ліувілля (2.6) нерівноважного статистичного оператора $\rho(x^N;\ t)$ необхідно сформулювати граничну умову, яка відповідає фізиці системи, що розглядається. Будемо вважати, що у початковий момент часу t_0 нерівноважний статистичний оператор $\rho(x^N;\ t)$ рівний квазірівноважному статистичному оператору $\rho_q(x^N;\ t)$, тобто

$$\rho(x^N;\ t)|_{t=t_0} = \rho_q(x^N;\ t_0),\ \ \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r};\ t)|_{t=t_0} = 0. \tag{2.11}$$

Тоді згідно з методом нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [15, 16], запізнюючі розв'язки рівняння Ліувілля (2.6) з граничною умовою (2.11) отримаємо, ввівши нескінченно мале джерело у праву частину рівняння Ліувілля (2.6):

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x^N;\ t) + iL_N\rho(x^N;\ t) = -\varepsilon(\rho(x^N;\ t) - \rho_q(x^N;\ t)), \tag{2.12}$$

де $\varepsilon \to +0$ після термодинамічного граничного переходу.

Оскільки нас буде цікавити гідродинамічний стан магнітної рідини, то квазірівноважний статистичний оператор $\rho_q(x^N;\ t)$ будемо шукати стандартним способом [15—17] із абсолютного екстремуму інформаційної ентропії при збереженні умови нормування

$$\int d\Gamma_N \rho_q(x^N;\ t) = 1 \tag{2.13}$$

та фіксованих значеннях середніх густин числа частинок $\langle\hat{n}(\boldsymbol{r})\rangle^t$, імпульсу $\langle\hat{\boldsymbol{P}}(\boldsymbol{r})\rangle^t$, повної енергії $\langle\hat{\varepsilon}(\boldsymbol{r})\rangle^t$ і магнітного моменту $\langle\hat{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{r})\rangle^t$. Цього набору динамічних змінних достатньо для опису гідродинаміки системи. У результаті для квазірівноважного статистичного оператора $\rho_q(x^N;\ t)$ отримаємо

$$\rho_q(x^N;t) = \exp\left\{-\Phi(t) - \int d\boldsymbol{r}\,\beta(\boldsymbol{r};t)(\hat{\varepsilon}'(\boldsymbol{r}) - \mu(\boldsymbol{r};t)\hat{n}(\boldsymbol{r}) - \boldsymbol{b}(\boldsymbol{r};t)\hat{M}(\boldsymbol{r}))\right\}, \tag{2.14}$$

де

$$\Phi(t) = \ln\int d\Gamma_N \exp\left\{-\int d\boldsymbol{r}\beta(\boldsymbol{r};\ t)(\hat{\varepsilon}'(\boldsymbol{r}) - \mu(\boldsymbol{r};\ t)\hat{n}(\boldsymbol{r}) - \boldsymbol{b}(\boldsymbol{r};\ t)\hat{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{r}))\right\} \tag{2.15}$$

— функціонал Масьє — Планка, а

$$\hat{\varepsilon}'(\boldsymbol{r}) = \hat{\varepsilon}(\boldsymbol{r}) - \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r};\ t)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) + \frac{m}{2}v^2(\boldsymbol{r};\ t)\hat{n}(\boldsymbol{r}) \tag{2.16}$$

— густина повної енергії у супроводжуючій системі координат, що рухається з елементом рідини з середньою гідродинамічною швидкістю $v(\boldsymbol{r};\ t)$. Динамічні змінні густин числа частинок $\hat{n}(\boldsymbol{r})$, імпульсу $\hat{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ та енергії $\hat{\varepsilon}(\boldsymbol{r})$

можна записати у наступному вигляді:

$$\hat{n}(\boldsymbol{r}) = \sum_{j=1}^{N} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j), \tag{2.17а}$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{p}_j \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j), \tag{2.17б}$$

$$\hat{\varepsilon}(\boldsymbol{r}) = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{l(l \neq j)}^{N} (\Phi(|\boldsymbol{r}_{lj}|) + J(|\boldsymbol{r}_{lj}|)\, \boldsymbol{s}_l \boldsymbol{s}_j) \right) \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j). \tag{2.17в}$$

Параметри $\beta(\boldsymbol{r};\ t)$, $\mu(\boldsymbol{r};\ t)$, $\boldsymbol{b}(\boldsymbol{r};\ t)$ знаходяться з умов самоузгодження:

$$\langle \hat{\varepsilon}'(\boldsymbol{r}) \rangle^t = \langle \hat{\varepsilon}'(\boldsymbol{r}) \rangle_q^t, \tag{2.18а}$$

$$\langle \hat{n}(\boldsymbol{r}) \rangle^t = \langle \hat{n}(\boldsymbol{r}) \rangle_q^t, \tag{2.18б}$$

$$\langle \hat{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{r}) \rangle^t = \langle \hat{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{r}) \rangle_q^t \tag{2.18в}$$

і задають відповідно локальні значення оберненої температури, хімічного потенціалу та «внутрішнього» магнітного поля частинок.

Для розв'язку рівняння Ліувілля (2.12) представимо його у такому вигляді:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL_N + \varepsilon \right) \Delta\rho(x^N;\ t) = -\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL_N \right) \rho_q(x^N;\ t), \tag{2.19}$$

де

$$\Delta\rho(x^N;\ t) = \rho(x^N;\ t) - \rho_q(x^N;\ t).$$

Розрахунок похідної $\frac{\partial}{\partial t} \rho_q(x^N,\ t)$ у правій частині (2.19) еквівалентний введенню проекційного оператора Кавасакі — Гантона $\mathcal{P}_q(t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_q(x^N;\ t) = -\mathcal{P}_q(t)\, iL_N \rho(x^N;\ t). \tag{2.20}$$

Проекційний оператор $\mathcal{P}_q(t)$ діє на статистичні оператори і відповідно до вигляду квазірівноважного статистичного оператора магнітної рідини (2.14) має таку структуру:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_q(t)\rho' = \Bigg[\rho_q(x^N;\ t) &- \int d\boldsymbol{r} \frac{\delta\rho_q(x^N;\ t)}{\delta \langle \hat{\varepsilon}'(\boldsymbol{r}) \rangle^t} \langle \hat{\varepsilon}'(\boldsymbol{r}) \rangle^t - \\ - \int d\boldsymbol{r} \frac{\delta\rho_q(x^N;\ t)}{\delta \langle \hat{n}(\boldsymbol{r}) \rangle^t} \langle \hat{n}(\boldsymbol{r}) \rangle^t &- \int d\boldsymbol{r} \frac{\delta\rho_q(x^N;\ t)}{\delta \langle \hat{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{r}) \rangle^t} \langle \hat{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{r}) \rangle^t \Bigg] \int d\Gamma_N \rho' + \\ + \int d\boldsymbol{r} \frac{\delta\rho_q(x^N;\ t)}{\delta \langle \hat{\varepsilon}'(\boldsymbol{r}) \rangle^t} \int d\Gamma_N \hat{\varepsilon}'(\boldsymbol{r}) \rho' &+ \int d\boldsymbol{r} \frac{\delta\rho_q(x^N;\ t)}{\delta \langle \hat{n}(\boldsymbol{r}) \rangle^t} \int d\Gamma_N \hat{n}(\boldsymbol{r}) \rho' + \\ + \int d\boldsymbol{r} \frac{\delta\rho_q(x^N;\ t)}{\delta \langle \hat{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{r}) \rangle^t} &\int d\Gamma_N \hat{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{r}) \rho'.\end{aligned} \tag{2.21}$$

Цей проекційний оператор володіє наступними властивостями:

$$\mathcal{P}_q(t)\rho(x^N;\ t') = \rho_q(x^N;\ t),\quad \mathcal{P}_q(t)\rho_q(x^N;\ t') = \rho_q(x^N;\ t),$$
$$\mathcal{P}_q(t)\mathcal{P}_q(t') = \mathcal{P}_q(t).$$

Враховуючи (2.20), рівняння (2.19) перепишемо у такому вигляді:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + (1 - \mathcal{P}_q(t))\, iL_N + \varepsilon \right) \Delta\rho(x^N;\ t) = -(1 - \mathcal{P}_q(t))\, iL_N\, \rho_q(x^N;\ t). \tag{2.22}$$

Формальним розв'язком цього рівняння є

$$\Delta\rho(x^N;\ t) = -\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} T(t,\ t')(1 - \mathcal{P}_q(t'))\, iL_N \rho_q(x^N;\ t')\, dt'.$$

Звідси отримаємо вираз для нерівноважного статистичного оператора:

$$\rho(x^N;\ t) = \rho_q(x^N;\ t) - \int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} T(t, t')(1 - \mathcal{P}_q(t'))\, iL_N(t')\, \rho_q(x^N;\ t')\, dt', \tag{2.23}$$

де

$$T(t, t') = \exp_+\left\{-\int\limits_{t'}^{t} (1 - \mathcal{P}_q(t'))\, iL_N dt'\right\} \tag{2.24}$$

— узагальнений оператор еволюції в часі з урахуванням проектування. Розкриємо дію операторів $\mathcal{P}_q(t')$ та $iL_N(t')$ у (2.23) на квазірівноважний статистичний оператор $\rho_q(x^N, t')$. Враховуючи структуру оператора Ліувілля (2.7), результат дії його на квазірівноважний статистичний оператор $\rho_q(x^N;\ t)$ запишемо у такому вигляді:

$$iL_N(t)\,\rho_q(x^N;\ t) = -\int d\boldsymbol{r}'\beta(\boldsymbol{r}';\ t')\int\limits_0^1 d\tau\, (\rho_q(x^N;\ t))^{\tau}\, (\dot{\hat{\varepsilon}}'_L(\boldsymbol{r}') -$$

$$-\mu(\boldsymbol{r}';\ t)\,\dot{\hat{n}}(\boldsymbol{r}'))\,(\rho_q(x^N;\ t))^{1-\tau} -$$

$$-\int d\boldsymbol{r}'\beta(\boldsymbol{r}';\ t)\int\limits_0^1 d\tau\,(\rho_q(x^N;\ t))^{\tau}\,(\dot{\hat{\varepsilon}}_s(\boldsymbol{r}') - \boldsymbol{b}(\boldsymbol{r}';\ t)\,\dot{\hat{\boldsymbol{M}}}(\boldsymbol{r}'))\,(\rho_q(x^N;\ t))^{1-\tau}, \tag{2.25}$$

де введені позначення дії оператора Ліувілля на динамічні змінні:

$$\begin{aligned}
&\dot{\hat{\varepsilon}}'_L(\boldsymbol{r}) = iL_N\hat{\varepsilon}'_L(\boldsymbol{r}) = iL_L\hat{\varepsilon}'_L(\boldsymbol{r}),\\
&\dot{\hat{n}}(\boldsymbol{r}) = iL_N\hat{n}(\boldsymbol{r}) = iL_L\hat{n}(\boldsymbol{r}),\\
&\dot{\hat{\varepsilon}}_s(\boldsymbol{r}) = iL_N\hat{\varepsilon}_s(\boldsymbol{r}),\quad \dot{\hat{\boldsymbol{M}}}(\boldsymbol{r}) = iL_N\hat{\boldsymbol{M}}(\boldsymbol{r}),
\end{aligned} \tag{2.26}$$

$\hat{\varepsilon}'_L(\boldsymbol{r})$ — класична частина повної густини енергії $\hat{\varepsilon}'(\boldsymbol{r})$ (2.16) у супроводжуючій системі відліку:

$$\hat{\varepsilon}'_L(\boldsymbol{r}) = \hat{\varepsilon}_L(\boldsymbol{r}) - \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r};\ t)\,\hat{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) + \frac{m}{2}v^2(\boldsymbol{r};\ t)\,\hat{n}(\boldsymbol{r}), \tag{2.27}$$

де

$$\hat{\varepsilon}_L(\boldsymbol{r}) = \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{l}^{N}\Phi(|\boldsymbol{r}_{jl}|)\right)\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j) \tag{2.28}$$

— класична рідинна частина густини повної енергії;

$$\hat{\varepsilon}_s(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}\sum_{l,f}^{N} J(|\boldsymbol{r}_{lf}|)\, s_l s_f\, \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_f) \tag{2.29}$$

— квантова частина густини повної енергії $\hat{\varepsilon}'_L(\boldsymbol{r})$.

Результат дії оператора $(1 - \mathcal{P}_q(t))$ на вираз (2.25) після нескладних перетворень можна представити у наступному вигляді:

$$(1 - \mathcal{P}_q(t'))\, iL_N(t')\,\rho_q(x^N;\ t') = -\int d\boldsymbol{r}'\beta(\boldsymbol{r}';\ t')\,[I^L_{\varepsilon}(\boldsymbol{r}';\ t') -$$

$$-\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}';\ t')\, I^L_{p}(\boldsymbol{r}';\ t')]\,\rho_q(x^N;\ t') - \int d\boldsymbol{r}'\beta(\boldsymbol{r}';\ t')\int\limits_0^1 d\tau\,(\rho_q(x^N;\ t'))^{\tau}\,(I^s_{\varepsilon}(\boldsymbol{r}';\ t') -$$

$$-\boldsymbol{b}(\boldsymbol{r}';\ t')\, I_M(\boldsymbol{r}';\ t')\,(\rho_q(x_N;\ t'))^{1-\tau}, \tag{2.30}$$

де

$$I^L_{\varepsilon}(\boldsymbol{r};\ t) = (1 - \mathcal{P}(t))\,\dot{\hat{\varepsilon}}_L(\boldsymbol{r}); \tag{2.31a}$$

$$I_p^L(r;t)=(1-\mathscr{P}(t))\dot{\hat{p}}(r); \tag{2.31б}$$

$$I_\varepsilon^s(r;t)=(1-\mathscr{P}(t))\dot{\hat{\varepsilon}}_s(r); \tag{2.31в}$$

$$I_M(r;t)=(1-\mathscr{P}(t))\dot{\hat{M}}(r) \tag{2.31г}$$

— узагальнені потоки; $\mathscr{P}(t)$ — залежний від часу проекційний оператор Морі, який діє на динамічні змінні (оператори) $\mathscr{A}(r)$:

$$\mathscr{P}(t)\mathscr{A}(r)=\langle\mathscr{A}(r)\rangle_q^t+\int dr'\frac{\delta\langle\mathscr{A}(r)\rangle^t q}{\delta\langle\hat{\varepsilon}'(r')^t\rangle}(\hat{\varepsilon}'(r')-\langle\hat{\varepsilon}'(r')\rangle^t)+$$
$$+\int dr'\frac{\delta\langle\mathscr{A}(r)\rangle_q^t}{\delta\langle\hat{n}(r')\rangle^t}(\hat{n}(r')-\langle\hat{n}(r')\rangle^t+$$
$$+\int dr'\frac{\delta\langle\mathscr{A}(r)\rangle_q^t}{\delta\langle\hat{M}(r')\rangle^t}(\hat{M}(r')-\langle\hat{M}(r')\rangle^t), \tag{2.32}$$

$\mathscr{P}(t)$ задовольняє операторні властивості,

$$\mathscr{P}(t)\mathscr{P}(t')=\mathscr{P}(t),\quad \mathscr{P}(t)(1-\mathscr{P}(t'))=0,$$
$$\mathscr{P}(t)\hat{\varepsilon}'(r)=\hat{\varepsilon}'(r),\quad \mathscr{P}(t)\hat{n}(r)=\hat{n}(r), \tag{2.33}$$
$$\mathscr{P}(t)\hat{M}(r)=\hat{M}(r).$$

Тепер можна знайти явний вигляд нерівноважного статистичного оператора $\rho(x^N,t)$. Для цього підставимо (2.30) у (2.33):

$$\rho(x^N;t)=\rho_q(x^N;t)+\int dr'\int_{-\infty}^{t}dt'e^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t')\int_0^1 d\tau(\rho_q(x^N;t')^\tau(I_\varepsilon^L(r';t')-$$
$$-v(r';t')I_p^L(r';t'))(\rho_q(x^N;t'))^{1-\tau}\beta(r';t')+$$
$$+\int dr'\int_{-\infty}^{t}dt'e^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t')\int_0^1 d\tau(\rho_q(x^N;t')^\tau(I_\varepsilon^s(r';t')-$$
$$-b(r';t')I_M(r';t'))(\rho_q(x^N;t'))^{1-\tau}\beta(r';t'). \tag{2.34}$$

Ми отримали нерівноважний статистичний оператор для магнітної рідини, що знаходиться у нерівноважному гідродинамічному стані. Система перебуває у зовнішньому неоднорідному магнітному полі $B(r;t)$, яке неявно входить у $\rho(x^N;t)$ через квантову частину оператора Ліувілля $i\hat{L}_s(t)$. Нерівноважний статистичний оператор виражається через дисипативні узагальнені потоки (2.31), які описують перенос у часі класичної і квантової частин густини енергії, густини імпульсу і магнітного моменту. Оскільки згідно з принципом скороченого опису гідродинамічного стану магнітної рідини нерівноважний статистичний оператор є функціоналом спостережуваних величин (середніх значень густин числа частинок, імпульсу, енергії і магнітного моменту: $\langle\hat{n}(r)\rangle^t$, $\langle\hat{p}(r)\rangle^t$, $\langle\hat{\varepsilon}(r)\rangle^t$, $\langle M(r)\rangle^t$), що змінюються у часі, то для них необхідно побудувати рівняння переносу, тобто рівняння гідродинаміки для магнітної рідини.

3. Узагальнені рівняння гідродинаміки магнітної рідини

Для отримання рівнянь переносу для середніх значень $\langle\hat{n}(r)\rangle^t$, $\langle\hat{p}(r)\rangle^t$, $\langle\hat{\varepsilon}(r)\rangle^t$, $\langle\hat{M}(r)\rangle^t$ скористаємось тотожностями

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{p}_n\rangle^t=\langle\dot{\hat{p}}_n\rangle^t=\langle\dot{\hat{p}}_n\rangle_q^t+\langle(1-\mathscr{P}(t))\dot{\hat{p}}n\rangle^t, \tag{3.1}$$

де $\hat{p}_n$ — сукупність змінних $\hat{n}(\mathbf{r})$, $\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$, $\hat{\varepsilon}(\mathbf{r})$, $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r})$, а $\dot{\hat{p}}_n = iL_N\hat{p}_n$, причому $(1 - \mathscr{P}(t))\hat{n}(\mathbf{r}) = 0$. Тоді, виконуючи усереднення у правій частині (3.1) з допомогою нерівноважного статистичного оператора (2.34), отримаємо узагальнені рівняння переносу для магнітної рідини:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}(\mathbf{r})\rangle^t = \langle\dot{\hat{n}}(\mathbf{r})\rangle^t_q, \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\rangle^t = \langle\dot{\hat{\mathbf{p}}}(\mathbf{r})\rangle^t_q -$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{pp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')\,\beta(\mathbf{r}', t')\,\mathbf{v}(\mathbf{r}', t')\,dt' +$$

$$+\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{p\varepsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')\,\beta(\mathbf{r}', t')\,dt' -$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{pM}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')\,\beta(\mathbf{r}', t')\,\mathbf{b}(\mathbf{r}', t')\,dt', \tag{3.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\varepsilon}(\mathbf{r})\rangle^t = \langle\dot{\hat{\varepsilon}}(\mathbf{r})\rangle^t_q -$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{\varepsilon p}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')\,\beta(\mathbf{r}', t')\,\mathbf{v}(\mathbf{r}', t')\,dt' +$$

$$+\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{\varepsilon\varepsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')\,\beta(\mathbf{r}', t')\,dt' -$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{\varepsilon M}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')\,\beta(\mathbf{r}', t')\,\mathbf{b}(\mathbf{r}', t')\,dt', \tag{3.4}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r})\rangle^t = \langle\dot{\hat{\mathbf{M}}}(\mathbf{r})\rangle^t_q -$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{Mp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')\,\beta(\mathbf{r}', t')\,\mathbf{v}(\mathbf{r}', t')\,dt' +$$

$$+\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{M\varepsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')\,\beta(\mathbf{r}', t')\,dt' -$$

$$-\int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{MM}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t')\,\beta(\mathbf{r}', t')\,\mathbf{b}(\mathbf{r}', t')\,dt'. \tag{3.5}$$

У цих рівняннях

$$\varphi_{pp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = \int d\Gamma_N \Big\{ I^L_p(\mathbf{r}, t)\,T(t, t') \times$$

$$\times \int_0^1 d\tau\,(\rho_q(x^N; t'))^\tau\,(I^L_p(\mathbf{r}'; t')\,(\rho_q(x^N; t'))^{1-\tau} \Big\}, \tag{3.6}$$

$$\varphi_{p\varepsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = \int d\Gamma_N \Big\{ I^L_p(\mathbf{r}, t)\,T(t, t') \times$$

$$\times \int_0^1 d\tau\,(\rho_q(x^N; t'))^\tau\,(I^L_\varepsilon(\mathbf{r}'_1; t') + I^s_\varepsilon(\mathbf{r}'; t'))\,(\rho_q(x^N; t'))^{1-\tau} \Big\}, \tag{3.7}$$

$$\varphi_{\varepsilon\varepsilon}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t') = \int d\Gamma_N \Big\{ I_\varepsilon^{\text{piq}}(\boldsymbol{r}, t)\, T(t, t') \times$$

$$\times \int_0^1 d\tau\, (\rho_q(x^N; t')^\tau (I_\varepsilon^L(\boldsymbol{r}'; t') + I_\varepsilon^s(\boldsymbol{r}'; t'))\, (\rho_q(x^N; t'))^{1-\tau}, \qquad (3.8)$$

$$\varphi_{pM}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t') = \int d\Gamma_N \Big\{ I_p^L(\boldsymbol{r}, t)\, T(t, t') \times$$

$$\times \int_0^1 d\tau\, (\rho_q(x^N; t')^\tau I_M(\boldsymbol{r}'; t')\, (\rho_q(x^N; t'))^{1-\tau} \Big\}, \qquad (3.9)$$

$$\varphi_{\varepsilon M}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t') = \int d\Gamma_N \Big\{ I_\varepsilon^L(\boldsymbol{r}, t)\, T(t, t') \times$$

$$\times \int_0^1 d\tau\, (\rho_q(x^N; t')^\tau I_M(\boldsymbol{r}'; t')\, (\rho_q(x^N; t'))^{1-\tau} \Big\}, \qquad (3.10)$$

$$\varphi_{MM}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t') = \int d\Gamma_N \Big\{ I_M^L(\boldsymbol{r}, t)\, T(t, t') \times$$

$$\times \int_0^1 d\tau\, (\rho_q(x^N; t')^\tau I_M(\boldsymbol{r}'; t')\, (\rho_q(x^N; t'))^{1-\tau} \Big\}. \qquad (3.11)$$

Аналогічну структуру мають функції $\varphi_{\varepsilon p}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t, t')$, $\varphi_{M\varepsilon}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t')$ та $\varphi_{Mp}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t')$. Функції $\varphi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t')$, де $\alpha, \beta = \{p, \varepsilon, M\}$,— це узагальнені ядра переносу (функції пам'яті), які зв'язані із узагальненими коефіцієнтами переносу магнітної рідини. Функція $\varphi_{pp}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t')$ описує в'язкі процеси в системі; $\varphi_{p\varepsilon}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t')$ описує динамічну кореляцію між в'язкими і тепловими процесами; $\varphi_{\varepsilon\varepsilon}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t')$ описує процеси, які зв'язані з переносом енергії і, як видно із виразу (3.7), містить чотири доданки, перший з яких описує динамічні кореляції класичної частини узагальненого потоку енергії $I_\varepsilon^B(\boldsymbol{r}; t)$, при цьому «спінова підсистема» поводить себе як «динамічний термостат». Другий і третій доданки $\varphi_{\varepsilon\varepsilon}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t, t')$ описують динамічні кореляції між класичною і квантовою частинами узагальненого потоку енергії $I_\varepsilon^L(\boldsymbol{r}; t)$ і $I_\varepsilon^s(\boldsymbol{r}; t)$, врахування яких може бути важливим при дослідженні явищ обміну енергією «магнітної підсистеми» з класичною «рідинною підсистемою» (за рахунок взаємодії з зовнішнім неоднорідним магнітним полем $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}; t)$). Четвертий доданок у функції пам'яті $\varphi_{\varepsilon\varepsilon}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t')$ описує динамічні кореляції магнітної частини узагальненого потоку енергії $I_\varepsilon^s(\boldsymbol{r}; t)$ і є основною частиною, яка відображає взаємодію зовнішнього неоднорідного магнітного поля $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}; t)$ із флуктуаціями густини енергії у магнітній рідині. У цілому ядро переносу $\varphi_{\varepsilon\varepsilon}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; t, t')$ описує процеси теплопровідності магнітної рідини при наявності зовнішнього магнітного поля $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}; t)$. Система рівнянь переносу (3.2) — (3.5) для вибраного набору динамічних змінних (2.5), (2.17) скороченого опису гідродинамічного стану магнітної рідини є точна і може бути використана для опису як сильно, так і слабо нерівноважних станів системи. Цим дослідженням будуть присвячені наступні праці.

1. *Busch G., Guentherodt H.-J.* Ferromagnetic Behaviour of liquid alloys // Phys. Lett. A.— 1968.— 27, N 2.— P. 110—112.
2. *Chen H. S., Sherwood R. C., Gyorgy E. M.* The influence of composition and aging on the Curie temperature of metallic glasses // IEEE Trans. Magn.— 1977.— **MAG13**, N 5.— P. 1538—1540.
3. *Хандрик К., Кобе С.* Аморфные ферро- и ферромагнетики.— М. : Мир, 1982.— 293 с.
4. *Hemmer P. C., Imbro P.* Ferromagnetic fluids // Phys. Rev. A: Gen. Phys.— 1977.— **16**, N 1.— P. 380—386.
5. *Kalaf T. K., Wu T. M.* Model calculation for a liquid ferromagnet // Phys. Rev. B.— 1978.— **18**, N 1.— P. 448—452.

6. *Carnie S. L., Stell G.* Nonlinear field effects in magnetic systems // Phys. Rev. B.— 1982.— 26, N 3.— P. 1389—1402.
7. *Вакарчук И. А., Рудавский Ю. К., Понедилок Г. В.* Микроскопическая теория жидкого состояния системы магнитных атомов.— Киев.— 1980.— 40 с.— (Препр. / АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-80-135Р).
8. *Вакарчук И. А., Рудавский Ю. К., Понедилок Г. В.* К проблеме жидкого ферромагнетика // УФЖ.— 1982.— 27, № 9.— С. 1414—1415.
9. *Вакарчук И. А., Рудавский Ю. К., Понедилок Г. В.* Микроскопическая теория аморфных и жидких ферромагнетиков // Сб. трудов «Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики». D-17-81-758.— Дубна, 1981.— С. 307—317.
10. *Вакарчук И. А., Рудавский Ю. К., Понедилок Г. В.* Теория жидких магнетиков // ТМФ.— 1984.— 58, № 3.— С. 445—460.
11. *Вакарчук И. А., Марголыч И. Ф.* Теория многосортных неупорядоченных магнетиков. Свободная энергия.— Киев, 1984.— 28 с. — (Препр. / АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-83-163Р).
12. *Вакарчук И. А., Марголыч И. Ф.* К теории многокомпонентных неупорядоченных магнетиков // ТМФ.— 1987.— 72, № 3.— С. 462—476.
13. *Ахиезер И. А., Ахиезер И. Т.* Колебания ферромагнитной жидкости // ЖЭТФ.— 1984.— 86, № 1.— С. 120—124.
14. *Ахиезер И. А., Ахиезер И. Т.* Колебания жидких ненасыщенных ферромагнетиков // ФТТ.— 1987.— 29, № 7.— С. 2167—2169.
15. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика.— М. : Наука, 1971.— 415 с.
16. *Зубарев Д. Н.* Современные методы статистической теории неравновесных процессов // Итоги науки и техники. Современные пробл. математики.— 1980.— 15.— С. 131—220.
17. *Калашников В. П., Ауслендер М. И.* Макроскопические уравнения динамики магнетиков. I. Линейные неравновесные процессы // ФММ.— 1977.— 44, вып. 4.— С. 710—726.

Інститут фізики конденсованих систем
АН України, Львів

Одержано 15.12.92

UDK 532/533;536;538.9

A. D. TROKHYMCHUK, O. A. PIZIO

OPTIMIZED CLUSTER THEORY FOR THE STRUCTURAL PROPERTIES OF MOLTEN IONIC SYSTEMS. MOLTEN PHASES OF AgI, Ag_2Se AND Ag_2S

The optimized cluster expansions are applied for the description of structural properties of the molten systems containing silver cations. The results for partial pair distribution functions and corresponding structure factors are presented. The coordination numbers are calculated. The detailed comparison with experimental and simulation data is given. It is shown that exponential approximations of OCE coincide quite well with HNC theory and simulation results.

1. Introduction

In the series of papers [1], a general scheme to construct optimized cluster expansions for liquid ionic systems has been presented. An interion interaction contains a short-range term due to steric repulsion and long-range Coulomb interaction. The former is considered as a reference system and the latter is treated by means of renormalized or screened potentials. The many-body correlations are allowed for at different levels of infinite series truncation. The method has been succesfully used for the molten alkali halides. An analysis of the cation and anion size ratio on the structural correlations has been presented also.

Further insight into the applicability of the theory for other systems is the main aim of this paper. We can widen the scope and it is necessary to do that by changing the charge state of cations or anions and both of them.

One can consider doubly-charged small cations in order to study the molten alkaline-earth halides. It is clear that intensity of interactions due to the change of cations charge will increase essentially. The renormalized potentials will increase also and some problems can arise when one truncates the optimized cluster expansions at some step. We shall investigate that problem in the sub-