

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-96-08U

О.В.Пацаган, Р.С.Мельник

ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРНИХ І ТЕРМОДИНАМІЧНИХ
ВЛАСТИВОСТЕЙ БІНАРНОЇ СУМІШІ ТВЕРДИХ СФЕР, ЩО
ВЗАЄМОДІЮТЬ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦІАЛ ЮКАВИ

УДК: 532; 533; 536.7

PACS: 05.70.Fh, 05.70.Jk, 64.60.Fr

Дослідження структурних і термодинамічних властивостей бінарної суміші твердих сфер, що взаємодіють через потенціал Юкави

О.В.Пацаган, Р.С.Мельник

Анотація. Розглянута неперервна двокомпонентна суміш твердих сфер, що взаємодіють через потенціал Юкави. В наближенні хаотичних фаз отримані аналітичні вирази для парціальних структурних факторів $S_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ і концентрація-концентрація структурного фактору $S_{cc}(\mathbf{k})$. Досліджено вплив зміни мікроскопічних параметрів на поведінку кривих $S_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ і температур спінодалі T^* . До вивчення застосований метод колективних змінних (КЗ) з виділеною системою відліку (СВ). Результати порівнюються з аналогічними, отриманими методом інтегральних рівнянь та Монте-Карло.

The investigation structural and thermodynamic properties of binary mixture of hard spheres interacting through an attractive Yukawa tail

O.V.Patsahan, R.S.Melnyk

Abstract. The continuous binary mixture of hard spheres interacting through an attractive Yukawa tail is considered. The explicit expressions for the partial structure factors $S_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ and the concentration-concentration structure factor $S_{cc}(\mathbf{k})$ are derived in the random phase approximation. The influence of variations of microscopic parameters on the behaviour of the curves $S_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ and on the temperature of spinodal T^* is investigated. The collective variables (CV) method with a reference system (RS) is applied to the study. The results are compared with the analogous ones obtained by the method of integral equations and Monte-Carlo method.

Подається до Українського фізичного журналу
Submitted to Ukrainian Journal of Physics

1. Вступ

Останніми роками з'явилося багато наукових публікацій предметом вивчення яких є фазова поведінка і структурні властивості флюїдних систем. Такі дослідження дають найважливішу частку інформації про природу широкого спектру речовин, встановлюють зв'язок між експериментом і теорією.

Бінарні флюїди, на відміну від однокомпонентних, мають значно цікавішу і різноманітнішу поведінку. Актуальною на сьогодні є задача дослідження бінарних флюїдів, які більше наближаються до реальних систем, тобто таких двокомпонентних систем, в яких частинки різних сортів відрізняються і розмірами ($\sigma_{aa} \neq \sigma_{bb} \neq \sigma_{ab}$) і величиною притягуючої взаємодії ($\Phi_{aa} \neq \Phi_{bb} \neq \Phi_{ab}$).

В даній роботі ми зосередимо увагу на бінарних сумішах твердих сфер, взаємодіючих через потенціал Юкави.

Кілька років тому в статті [4] були опубліковані результати середньосферичного наближення (ССН) для такого типу сумішей, а автори публікації [9] провели подібні дослідження методом Монте-Карло і дали порівняльну характеристику. Слід зауважити, що результати обох методів мають добру узгодженість (розходження не більше 10%).

В цій роботі методом колективних змінних (КЗ) з виділеною системою відліку (СВ) обраховані парціальні структурні фактори $S_{\gamma\sigma}(\mathbf{k})$ і концентрація-концентрація структурний фактор $S_{cc}(\mathbf{k})$ бінарного флюїду і досліджено вплив на них зміни мікроскопічних параметрів ($\sigma_{aa}/\sigma_{bb} = \alpha$ -розмірний коефіцієнт, $\eta = \frac{\pi}{6}\rho\sigma_{bb}^3(x + (1-x)\alpha^3)$ -приведена густина, x -концентрація частинок сорту "b", $q = \epsilon_{bb}/\epsilon_{aa}$ -коефіцієнт "подібної" взаємодії, $r = \epsilon_{ab}/\epsilon_{aa}$ -коефіцієнт "неподібної" взаємодії, $\epsilon_{ij} = C_{ij}/\sigma_{ij}$).

Обрахунки проведені в гаусовому наближенні функціоналу великої статистичної суми.

Результати порівнюються з відомими, отриманими методом інтегральних рівнянь і методом Монте-Карло.

2. Постановка задачі

Розглядається двокомпонентна система твердих сфер, яка містить N_a частинок сорту "a" і N_b частинок сорту "b" і яка знаходиться в об'ємі V при температурі T .

Потенціальну енергію $U_{N_a N_b}$ можна представити у вигляді суми двох доданків:

$$U_{N_a N_b} = \frac{1}{2} \sum_{\gamma, \delta=a, b} \sum_{i, j} U_{\gamma\delta}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \frac{1}{2} \sum_{\gamma, \delta=a, b} \sum_{i, j} \{ \Psi_{\gamma\delta}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) + \Phi_{\gamma\delta}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \}. \quad (2.1)$$

$\Psi_{\gamma\delta}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ -потенціал попарної взаємодії на малих віддальях, що характеризує взаємну непроникливість частинок:

$$\Psi_{\gamma\delta}(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq \sigma_{\gamma\delta} \\ 0, & r > \sigma_{\gamma\delta} \end{cases} \quad \sigma_{\gamma\delta} = \frac{1}{2}(\sigma_{\gamma\gamma} + \sigma_{\delta\delta}), \quad (2.2)$$

$\sigma_{\gamma\gamma}$ -діаметр твердої сфери сорту "γ". $\Phi_{\gamma\delta}(r)$ описує взаємодію притягання між двома частинками. В цій роботі $\Phi_{\gamma\delta}(r)$ вибраний у вигляді потенціалу Юкави:

$$\Phi_{\gamma\delta}(r) = \begin{cases} 0, & r \leq \sigma_{\gamma\delta} \\ -\frac{C_{\gamma\delta}}{r} \exp[-Z_{\gamma\delta}(r - \sigma_{\gamma\delta})], & r > \sigma_{\gamma\delta} \end{cases}, \quad (2.3)$$

де $C_{\gamma\delta}$, $Z_{\gamma\delta}$ -параметри потенціалу, деякі додатні величини.

Фур'є-образ потенціалу $\Phi_{\gamma\delta}(r)$ має вигляд:

$$\tilde{\Phi}_{\gamma\delta}(\mathbf{k}) = -\frac{4\pi C_{\gamma\delta}}{Z_{\gamma\delta}^2 + k^2} \left(\frac{Z_{\gamma\delta}}{k} \sin k\sigma_{\gamma\delta} + \cos k\sigma_{\gamma\delta} \right). \quad (2.4)$$

За систему відліку в даній роботі взята система твердих сфер. Потрібну нам інформацію про поведінку системи відліку ми отримуємо через фур'є-образи парних кореляційних функцій системи відліку, які визначаються з рівняння Орнштейна-Церніке для суміші:

$$h_{ij}(\mathbf{r}) = C_{ij}(\mathbf{r}) + \sum_{l=1,2} \rho_l \int d\mathbf{r}' C_{il}(\mathbf{r}) h_{lj}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad (2.5)$$

і рівняння Перкуса-Йєвіка [5]:

$$g_{ij}(\mathbf{r}) \left(e^{-\beta\Phi_{ij}(\mathbf{r})} - 1 \right) = e^{-\beta\Phi_{ij}(\mathbf{r})} C_{ij}(\mathbf{r}). \quad (2.6)$$

$h_{ij}^{(2)}(\mathbf{r}) = g_{ij}(\mathbf{r}) - 1$, $C_{ij}(\mathbf{r})$ - пряма кореляційна функція.

Потрібні для наших досліджень дані про систему відліку взяті з роботи [3].

Тестом для теорії бінарних систем є обрахунок трьох статичних структурних факторів - величин, які міряються експериментально і визначаються як:

$$S_{\gamma\delta}(\mathbf{k}) = \delta_{\gamma\delta} + (x_\gamma x_\delta)^{1/2} \rho \int h_{\gamma\delta}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (\gamma, \delta = a, b), \quad (2.7)$$

де $\rho = \frac{N}{V}$ -загальна густина частинок, $x_\gamma = \frac{N_\gamma}{N}$ -концентрація сорту "γ", $h_{\gamma\delta}(\mathbf{r})$ - парна кореляційна функція.

Комбінація парціальних структурних факторів $S_{\gamma\delta}(\mathbf{k})$ представляє концентрація-концентрація структурний фактор $S_{cc}(\mathbf{k})$:

$$S_{cc}(\mathbf{k}) = x(1-x) [(1-x)S_{bb}(\mathbf{k}) + xS_{aa}(\mathbf{k}) - 2(x(1-x))^{1/2}S_{ab}(\mathbf{k})], \quad (2.8)$$

x -концентрація частинок сорту "b".

Структурні і термодинамічні величини взаємопов'язані в границі $k \rightarrow 0$. Одним з прикладів таких співвідношень є рівняння стисливості, яке для випадку сумішей має вигляд:

$$a \equiv (\rho k_B T K_T)^{-1} = 1 - \rho \sum_{\gamma, \delta} x_\gamma x_\delta \tilde{C}_{\gamma\delta}(0), \quad (\gamma, \delta = a, b), \quad (2.9)$$

де K_T -ізотермічна стисливість, $\tilde{C}_{\gamma\delta}(k)$ - фур'є-образ прямої кореляційної функції $C_{\gamma\delta}(\mathbf{r})$, k_B - стала Больцмана.

Величину "a" можна також виразити і через комбінацію $S_{\gamma\delta}(\mathbf{k})$ і $S_{cc}(\mathbf{k})$ в границі $\mathbf{k} \rightarrow 0$:

$$a = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} x(1-x) \frac{[S_{aa}(\mathbf{k})S_{bb}(\mathbf{k}) - S_{ab}^2(\mathbf{k})]}{S_{cc}(\mathbf{k})}. \quad (2.10)$$

В границі $\mathbf{k} \rightarrow 0$ також відоме співвідношення

$$S_{cc}(0) = \frac{N K_B T}{\left(\frac{\partial^2 G}{\partial x^2}\right)_{T,P}}. \quad (2.11)$$

Тут N -загальна кількість частинок. А умовою стабільності суміші є вираз:

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial x^2}\right)_{T,P} > 0. \quad (2.12)$$

Рівняння спінодалі:

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial x^2}\right)_{T,P} = 0. \quad (2.13)$$

Співвідношення (2.11) дає змогу двома шляхами отримати спінодаль. Один з них - обрахувати праву частину (2.8) при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ і використати (2.11), (2.13).

3. Структурні фактори бінарної суміші.

3.1. Знаходження $S_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ через $\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1, \alpha} \hat{\rho}_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle$

Нехай $\rho_\alpha(\mathbf{r})$ - локальна густина частинок сорту α . Тоді в результаті фур'є-перетворень отримаємо:

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}, \alpha} = \int \sum_{i=1}^{N_\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i^\alpha) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3.1)$$

або

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}, \alpha} = \sum_{i=1}^{N_\alpha} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i^\alpha). \quad (3.2)$$

Корелятор $\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1, \alpha} \hat{\rho}_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle$ для системи, взаємодія у якій має вигляд (2.1), у великому канонічному ансамблі можем представити як:

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1, \alpha} \hat{\rho}_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{N_{a_1}=0}^{\infty} \sum_{N_{a_2}=0}^{\infty} \cdots \sum_{N_{a_m}=0}^{\infty} \prod_{\gamma=a_1}^{a_m} \frac{Z_\gamma^{N_\gamma}}{N_\gamma!} \int (d\Gamma) \times \\ \times \exp(-\beta U_{N_{a_1} \dots N_{a_m}}) \sum_{i=1}^{N_\alpha} \exp(-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_i^\alpha) \sum_{j=1}^{N_\beta} \exp(-i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_j^\beta). \quad (3.3)$$

Ξ - велика статистична сума m -сортної системи:

$$\Xi = \sum_{N_{a_1}=0}^{\infty} \sum_{N_{a_2}=0}^{\infty} \cdots \sum_{N_{a_m}=0}^{\infty} \prod_{\gamma=a_1}^{a_m} \left(\frac{Z_\gamma^{N_\gamma}}{N_\gamma!} \right) \int (d\Gamma) \times \\ \times \exp(-\beta U_{N_{a_1} \dots N_{a_m}}). \quad (3.4)$$

Тут введені позначення: $(d\Gamma) = \prod_{\gamma=a_1}^{a_m} d\Gamma_{N_\gamma}$, $d\Gamma_{N_\gamma}$ – елемент конфігураційного простору частинок сорту γ : $d\Gamma_{N_\gamma} = d\mathbf{r}_1^\gamma d\mathbf{r}_2^\gamma \dots d\mathbf{r}_{N_\gamma}^\gamma$, $Z_\gamma = \exp(\beta\mu'_\gamma)$; $\mu'_\gamma = \mu_\gamma + \beta^{-1} \ln \left[\sqrt{2\pi m_\gamma \beta^{-1} h^3} \right]$ – повний хімічний потенціал частинки сорту γ ; $\beta = 1/k_B T$ – обернена температура, m_γ – маса частинок сорту γ ; h – стала Планка.

Формулу (3.3) можна записати:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1, \alpha} \hat{\rho}_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle = & \delta_{\alpha\beta} \langle N_\alpha \rangle \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2} + \int \exp(-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1^\alpha) \times \\ & \times \exp(-i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2^\beta) d\mathbf{r}_1^\alpha d\mathbf{r}_2^\beta \left[\frac{1}{\Xi} \sum_{N_{a_1}=0}^{\infty} \sum_{N_{a_2}=0}^{\infty} \dots \sum_{N_{a_m}=0}^{\infty} \prod_{\gamma=a_1}^{a_m} \frac{Z_\gamma^{N_\gamma}}{N_\gamma!} \times \right. \\ & \left. \times N_\alpha (N_\beta - \delta_{\alpha\beta}) \int \frac{d\mathbf{r}_1^\alpha d\mathbf{r}_2^\beta}{(d\Gamma)} \exp(-\beta U_{N_{a_1} \dots N_{a_m}}) \right]. \quad (3.5) \end{aligned}$$

Запис $\frac{d\mathbf{r}_1^\alpha d\mathbf{r}_2^\beta}{(d\Gamma)}$ означає, що з елемента фазового об'єму виключені диференціали $d\mathbf{r}_1^\alpha d\mathbf{r}_2^\beta$.

За означенням бінарна і унарна функції розподілу у великому канонічному ансамблі [2]:

$$\begin{aligned} \frac{\langle N_\alpha \rangle \langle N_\beta \rangle}{V^2} g_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{r}_2^\beta) = & \frac{1}{\Xi} \sum_{N_{a_1}=0}^{\infty} \sum_{N_{a_2}=0}^{\infty} \dots \sum_{N_{a_m}=0}^{\infty} \times \\ & \times \prod_{\gamma=a_1}^{a_m} \frac{Z_\gamma^{N_\gamma}}{N_\gamma!} N_\alpha (N_\beta - \delta_{\alpha\beta}) \int \frac{d\mathbf{r}_1^\alpha d\mathbf{r}_2^\beta}{d\Gamma} \exp(-\beta U_{N_{a_1} \dots N_{a_m}}) \quad (3.6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\langle N_\alpha \rangle}{V} g_\alpha(\mathbf{r}_1^\alpha) = & \frac{1}{\Xi} \sum_{N_{a_1}=0}^{\infty} \sum_{N_{a_2}=0}^{\infty} \dots \sum_{N_{a_m}=0}^{\infty} \prod_{\gamma=a_1}^{a_m} \frac{Z_\gamma^{N_\gamma}}{N_\gamma!} N_\alpha \times \\ & \times \int \frac{d\mathbf{r}_1^\alpha}{(d\Gamma)} \exp(-\beta U_{N_{a_1} \dots N_{a_m}}). \quad (3.7) \end{aligned}$$

А тому (3.5) запишем:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1, \alpha} \hat{\rho}_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle = & \delta_{\alpha\beta} \langle N_\alpha \rangle \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2} + \int \exp(-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1^\alpha) \times \\ & \times \exp(-i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2^\beta) d\mathbf{r}_1^\alpha d\mathbf{r}_2^\beta \frac{\langle N_\alpha \rangle \langle N_\beta \rangle}{V^2} g_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{r}_2^\beta). \quad (3.8) \end{aligned}$$

Парна кореляційна функція m -компонентної системи у великому канонічному ансамблі визначається так [2]:

$$h_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{r}_2^\beta) = g_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{r}_2^\beta) - g_\alpha(\mathbf{r}_1^\alpha) g_\beta(\mathbf{r}_2^\beta). \quad (3.9)$$

Використовуючи (3.6), (3.7) отримаємо:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1, \alpha} \hat{\rho}_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle = & \delta_{\alpha\beta} \langle N_\alpha \rangle \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2} + \int \exp(-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1^\alpha) \times \\ & \times \exp(-i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2^\beta) d\mathbf{r}_1^\alpha d\mathbf{r}_2^\beta \left(\frac{\langle N_\alpha \rangle \langle N_\beta \rangle}{V^2} h_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1^\alpha, \mathbf{r}_2^\beta) + \right. \\ & \left. + \frac{\langle N_\alpha \rangle \langle N_\beta \rangle}{V^2} \right), \quad (3.10) \end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned} \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1, \alpha} \hat{\rho}_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle = & \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2} \sqrt{\langle N_\alpha \rangle \langle N_\beta \rangle} (\delta_{\alpha\beta} + \\ & + \frac{\sqrt{\langle N_\alpha \rangle \langle N_\beta \rangle}}{V} \tilde{h}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_2) + \sqrt{\langle N_\alpha \rangle \langle N_\beta \rangle} \delta_{\mathbf{k}_2}), \quad (3.11) \end{aligned}$$

де $\tilde{h}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_2) = \int h_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_{21}^{\alpha\beta}) \exp(-i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_{21}^{\alpha\beta}) d\mathbf{r}_{21}^{\alpha\beta}$ – фур'є-образ парної кореляційної функції $h_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_{21}^{\alpha\beta})$

$$\mathbf{r}_{21}^{\alpha\beta} = \mathbf{r}_2^\beta - \mathbf{r}_1^\alpha. \quad (3.12)$$

За означенням парціальний структурний фактор має вигляд:

$$S_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{\sqrt{\langle N_\alpha \rangle \langle N_\beta \rangle}}{V} \tilde{h}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}). \quad (3.13)$$

Тому можем записати:

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = & \frac{1}{\sqrt{\langle N_\alpha \rangle \langle N_\beta \rangle}} \{ \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1, \alpha} \hat{\rho}_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle - \\ & - \langle N_\alpha \rangle \langle N_\beta \rangle \delta_{\mathbf{k}_2} \}. \quad (3.14) \end{aligned}$$

3.2. Момент $\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1, \alpha} \hat{\rho}_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle$ в методі колективних змінних (КЗ) з виділеною системою відліку (СВ) у великому канонічному ансамблі.

Функціонал великої статистичної суми можна представити у вигляді:

$$\Xi = \sum_{N_{a_1}=0}^{\infty} \sum_{N_{a_2}=0}^{\infty} \dots \sum_{N_{a_m}=0}^{\infty} \prod_{\gamma=a_1}^{a_m} \frac{Z_{\gamma}^{N_{\gamma}}}{N_{\gamma}!} \int (d\Gamma) \times \\ \times \exp(-\beta \Psi_{N_{a_1} \dots N_{a_m}}) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\gamma, \delta=a_1}^{a_m} \sum_{\mathbf{k}=0}^{\infty} \alpha_{\gamma\delta}(\mathbf{k}) \times \right. \\ \left. \times (\hat{\rho}_{\mathbf{k}, \gamma} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}, \delta} - N_{\gamma} \delta_{\gamma\delta}) \right\}, \quad (3.15)$$

де

$$\alpha_{\gamma\delta}(\mathbf{k}) = \frac{\beta}{V} \tilde{\Phi}_{\gamma\delta}(\mathbf{k}). \quad (3.16)$$

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}, \gamma} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}, \delta} \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{N_{a_1}=0}^{\infty} \sum_{N_{a_2}=0}^{\infty} \dots \sum_{N_{a_m}=0}^{\infty} \prod_{\gamma=a_1}^{a_m} \frac{Z_{\gamma, 0}^{N_{\gamma}}}{N_{\gamma}!} \times \\ \times \int (d\Gamma) \exp(-\beta \Psi_{N_{a_1} \dots N_{a_m}}) \exp(\beta \bar{\mu}_1^{\gamma} \hat{\rho}_{0, \gamma}) \hat{\rho}_{\mathbf{k}, \gamma} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}, \delta} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\gamma, \delta=a_1}^{a_m} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\gamma\delta}(\mathbf{k}) (\hat{\rho}_{\mathbf{k}, \gamma} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}, \delta} - \hat{\rho}_{0, \gamma} \delta_{\gamma\delta}) \right\}; \quad (3.17)$$

$\bar{\mu}_1^{\gamma}$ - додатковий хімічний потенціал частинки сорту γ :

$$\bar{\mu}_1^{\gamma} = \mu'_{\gamma} - \mu_0^{\gamma}. \quad (3.18)$$

Вираз (3.17), записаний через колективні змінні:

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}, \gamma} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}, \delta} \rangle = \frac{\Xi_0}{\Xi} \int \exp(\beta \mu_1^{\gamma} \rho_{0, \gamma}) \rho_{\mathbf{k}, \gamma} \rho_{-\mathbf{k}, \delta} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\gamma, \delta=a_1}^{a_m} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\gamma\delta}(\mathbf{k}) (\rho_{\mathbf{k}, \gamma} \rho_{-\mathbf{k}, \delta}) \right\} J(\rho)(d\rho). \quad (3.19)$$

Тут

$$\mu_1^{\gamma} = \bar{\mu}_1^{\gamma} + \frac{\beta}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\Phi}_{\gamma\gamma}(\mathbf{k}); \quad (3.20)$$

Ξ_0 -велика статистична сума системи відліку (m -сортної системи твердих кульок). $J(\rho)$ -якобіан переходу до КЗ, усереднений по СВ.

$$\rho_{\mathbf{k}, \gamma} = \rho_{\mathbf{k}, \gamma}^c - i \rho_{\mathbf{k}, \gamma}^s, \quad (3.21)$$

$$(d\rho) = \prod_{\gamma=a, b} d\rho_{0, \gamma} \prod_{\mathbf{k} \neq 0} d\rho_{\mathbf{k}, \gamma}^c d\rho_{\mathbf{k}, \gamma}^s, \quad (3.22)$$

$\rho_{\mathbf{k}, \gamma}^c, \rho_{\mathbf{k}, \gamma}^s$ -колективні змінні, що описують величину k -ої моди коливань густини частинок сорту γ .

Вираз (3.19) можна переписати

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}, \gamma} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}, \delta} \rangle = \frac{1}{\Xi_1} \frac{\partial}{\partial (-\frac{1}{2} \alpha_{\gamma\delta}(\mathbf{k}))} \int \exp(\beta \mu_1^{\gamma} \rho_{0, \gamma}) \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\gamma, \delta=a_1}^{a_m} \sum_{\mathbf{k}} (\alpha_{\gamma\delta}(\mathbf{k}) (\rho_{\mathbf{k}, \gamma} \rho_{-\mathbf{k}, \delta})) \right\} J(\rho)(d\rho), \quad (3.23)$$

де

$$\Xi_1 = \int \exp \left\{ \beta \sum_{\gamma=a_1}^{a_m} \mu_1^{\gamma} \rho_{0, \gamma} - \frac{1}{2} \sum_{\gamma, \delta} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\gamma\delta}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}, \gamma} \rho_{-\mathbf{k}, \delta} \right\} \\ \times J(\rho)(d\rho). \quad (3.24)$$

Таким чином, ми отримуємо вирази:

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}, \gamma} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}, \delta} \rangle = -2 \frac{\partial}{\partial \alpha_{\gamma\delta}(\mathbf{k})} \ln \Xi_1(T, V, \mu_1^{\gamma}) \\ \langle \hat{\rho}_{0, \gamma} \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta \mu_1^{\gamma}} \ln \Xi_1. \quad (3.25)$$

3.3. Вирази для $S_{\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$.

Використовуючи обрахунки, зроблені в [3], можемо записати:

$$\begin{aligned} \ln \Xi_1^G = & \left\{ -H(0) + \frac{1}{2W(0)} (a_{11}(0)M_2^2(0) - \right. \\ & \left. - 2a_{12}(0)M_1(0)M_2(0) + a_{22}(0)M_1^2(0)) \right\} + \\ & + \frac{1}{2 \langle N_a \rangle \langle N_b \rangle} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left[\frac{1}{\Delta(\mathbf{k})W(\mathbf{k})} \right]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Тут введені наступні позначення:

$$\begin{aligned} H(0) = & \frac{1}{2\Delta(0)} [\langle N_a \rangle S_{bb}^0(0) + \langle N_b \rangle S_{aa}^0(0) - \\ & - 2\sqrt{\langle N_a \rangle \langle N_b \rangle} S_{ab}^0(0)] \\ M_1(0) = & \beta \mu_1^a + \left(S_{bb}^0(0) - \sqrt{\frac{\langle N_b \rangle}{\langle N_a \rangle}} S_{ab}^0(0) \right) / \Delta(0) \\ M_2(0) = & \beta \mu_1^b + \left(S_{aa}^0(0) - \sqrt{\frac{\langle N_a \rangle}{\langle N_b \rangle}} S_{ab}^0(0) \right) / \Delta(0) \\ a_{11}(\mathbf{k}) = & \alpha_{aa}(\mathbf{k}) + \frac{1}{\langle N_a \rangle} \frac{S_{bb}^0(\mathbf{k})}{\Delta(\mathbf{k})} \\ a_{12}(\mathbf{k}) = & \alpha_{ab}(\mathbf{k}) - \frac{S_{ab}^0(\mathbf{k})}{\sqrt{\langle N_a \rangle \langle N_b \rangle} \Delta(\mathbf{k})} \\ a_{22}(\mathbf{k}) = & \alpha_{bb}(\mathbf{k}) + \frac{S_{aa}^0(\mathbf{k})}{\langle N_b \rangle \Delta(\mathbf{k})} \\ \Delta(\mathbf{k}) = & S_{aa}^0(\mathbf{k})S_{bb}^0(\mathbf{k}) - (S_{ab}^0(\mathbf{k}))^2 \\ W(\mathbf{k}) = & a_{11}(\mathbf{k})a_{22}(\mathbf{k}) - a_{12}^2(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (3.27)$$

$S_{aa}^0(\mathbf{k}), S_{bb}^0(\mathbf{k}), S_{ab}^0(\mathbf{k})$ - парціальні структурні фактори СВ.

Продиференціювавши $\ln \Xi_1^G$ по $\alpha_{\gamma\delta}(\mathbf{k})$ і пам'ятаючи означення (3.14), можемо записати вирази для парціальних структурних факторів $S_{ij}(\mathbf{k})$ і $S_{cc}(\mathbf{k})$ в гаусовому наближенні:

$$S_{aa}(\mathbf{k}) = \frac{\alpha_{bb}(\mathbf{k})}{\langle N_a \rangle W(\mathbf{k})} + \frac{S_{aa}^0(\mathbf{k})}{\langle N_a \rangle \langle N_b \rangle \Delta(\mathbf{k})W(\mathbf{k})}$$

$$\begin{aligned} S_{bb}(\mathbf{k}) = & \frac{\alpha_{aa}(\mathbf{k})}{\langle N_b \rangle W(\mathbf{k})} + \frac{S_{bb}^0(\mathbf{k})}{\langle N_a \rangle \langle N_b \rangle \Delta(\mathbf{k})W(\mathbf{k})} \\ S_{ab}(\mathbf{k}) = & - \left(\frac{\alpha_{ab}(\mathbf{k})}{\sqrt{\langle N_a \rangle \langle N_b \rangle} W(\mathbf{k})} - \right. \\ & \left. - \frac{S_{ab}^0(\mathbf{k})}{\langle N_a \rangle \langle N_b \rangle \Delta(\mathbf{k})W(\mathbf{k})} \right). \end{aligned} \quad (3.28)$$

В термінах наших позначень:

$$\begin{aligned} \langle N_a \rangle \langle N_b \rangle W(\mathbf{k})\Delta(\mathbf{k}) = & (S_{aa}^0(\mathbf{k})S_{bb}^0(\mathbf{k}) - \\ & - (S_{ab}^0(\mathbf{k}))^2) \left[\beta^2 \rho^2 x(1-x) \tilde{\Phi}_{aa}(\mathbf{k}) \tilde{\Phi}_{bb}(\mathbf{k}) - \right. \\ & \left. - \beta^2 \rho^2 x(1-x) \tilde{\Phi}_{ab}^2(\mathbf{k}) \right] + S_{aa}^0(\mathbf{k})\beta\rho(1-x) \tilde{\Phi}_{aa}(\mathbf{k}) + \\ & + S_{bb}^0(\mathbf{k})\beta\rho x \tilde{\Phi}_{bb}(\mathbf{k}) + 2S_{ab}^0(\mathbf{k})\beta\rho\sqrt{x(1-x)} \tilde{\Phi}_{ab}(\mathbf{k}) + 1. \end{aligned} \quad (3.29)$$

В якості перевірки розглянемо $S_{ij}(\mathbf{k})$ при $\alpha_{ij}(\mathbf{k}) \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \langle N_a \rangle \langle N_b \rangle W(\mathbf{k})\Delta(\mathbf{k}) \rightarrow 1 \\ S_{aa}(\mathbf{k}) \rightarrow S_{aa}^0(\mathbf{k}); \quad S_{ab}(\mathbf{k}) \rightarrow S_{ab}^0(\mathbf{k}); \quad S_{bb}(\mathbf{k}) \rightarrow S_{bb}^0(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Отже, при відсутності далекосяжного потенціалу наші розрахунки прямують до відповідних виразів для системи відліку.

У нашому випадку:

$$\begin{aligned} S_{cc}(\mathbf{k}) = & \frac{1}{\langle N_a \rangle \langle N_b \rangle \Delta(\mathbf{k})W(\mathbf{k})} \left\{ S_{cc}^0(\mathbf{k}) + \beta\rho x(1-x) \times \right. \\ & \times (S_{aa}^0(\mathbf{k})S_{bb}^0(\mathbf{k}) - (S_{ab}^0(\mathbf{k}))^2) (x^2 \tilde{\Phi}_{bb}(\mathbf{k}) + (1-x)^2 \tilde{\Phi}_{aa}(\mathbf{k}) + \\ & \left. + 2x(1-x) \tilde{\Phi}_{ab}(\mathbf{k}) \right\} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Тут $S_{cc}^0(\mathbf{k})$ - концентрація-концентрація структурний фактор СВ.

Аналіз рівнянь (2.11) і (2.13) свідчить, що температури спінодали можна визначити з умови:

$$S_{cc}(0) \rightarrow \infty. \quad (3.32)$$

Пам'ятаючи (3.31), умову (3.32) перепишемо:

$$\det(a_{11}(0)a_{22}(0) - a_{12}^2(0)) = 0 \quad (3.33)$$

Перевіримо чи справджується співвідношення [4]:

$$\mathcal{M}_{\gamma_1 \dots \gamma_n}(0, \dots, 0) = \left(\frac{\partial^{n-1} \langle N_{\gamma_1} \rangle}{\partial \beta \mu_1^{\gamma_2} \partial \beta \mu_2^{\gamma_3} \dots \partial \beta \mu_1^{\gamma_n}} \right)_{V, T, \mu_1^{\gamma_n}} \quad (3.34)$$

для всієї системи.

Оскільки $\langle \hat{\rho}_{0, \gamma_1} \rangle = \langle N_{\gamma_1} \rangle$ і $\langle \hat{\rho}_{0, \gamma_1} \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta \mu_1^{\gamma_1}} \ln \Xi_1$, то ми маємо можливість порахувати парціальні структурні фактори при $\mathbf{k}_i = 0$, використавши співвідношення:

$$\mathcal{M}_{\gamma_1 \dots \gamma_n}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) = \sqrt[n]{N_{\gamma_1} \dots N_{\gamma_n}} \times S_{\gamma_1 \dots \gamma_n}(\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_n) \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n}$$

В гаусовому наближенні для функціоналу великої статистичної суми вирази для бінарних парціальних структурних факторів, пораховані таким шляхом, співпадають з (3.28) при $\mathbf{k} = 0$.

4. Результати

Введем позначення: $T^* = (\beta \epsilon_{aa})^{-1}$, $z = z_{ij}$, $y = k \sigma_{bb}$, $z^* = z \sigma_{aa}$.

В термінах цих безрозмірних позначень вирази для $\rho \beta x \tilde{\Phi}_{bb}(\mathbf{k})$, $\beta \rho (1-x) \tilde{\Phi}(\mathbf{k})$ і $\beta \rho \sqrt{x(1-x)} \tilde{\Phi}_{ab}(\mathbf{k})$ матимуть вигляд:

$$\beta \rho x \tilde{\Phi}_{bb}(\mathbf{k}) = - \frac{24 \eta x q \alpha^2 (T^*)^{-1}}{(x + (1-x) \alpha^3) ((z^*)^2 + (\alpha y)^2)} \times \left(\frac{z^*}{\alpha y} \sin y + \cos y \right), \quad (4.1)$$

$$\beta \rho (1-x) \tilde{\Phi}_{aa}(\mathbf{k}) = - \frac{24 \eta \alpha^3 (T^*)^{-1}}{(x + (1-x) \alpha^3) ((z^*)^2 + (\alpha y)^2)} \times \left(\frac{z^*}{\alpha y} \sin \alpha y + \cos \alpha y \right), \quad (4.2)$$

$$\beta \rho \sqrt{x(1-x)} \tilde{\Phi}_{ab}(\mathbf{k}) = - \frac{12 \eta r \sqrt{x(1-x)} (T^*)^{-1} \alpha^2 (1+\alpha)}{(x + (1-x) \alpha^3) ((z^*)^2 + (\alpha y)^2)} \times \left(\cos \frac{y}{2} (\alpha + 1) + \frac{z^*}{\alpha y} \sin \frac{y}{2} (\alpha + 1) \right), \quad (4.3)$$

Слід зауважити, що більшість наших розрахунків проводились при певних значеннях параметрів потенціалу. А саме $z^* = 2.45$ і $\epsilon_{aa} = \epsilon_{Ar}$, де ϵ_{Ar} - значення відповідного параметра потенціалу Леннард-Джонса для аргону. Це зумовлено тим, що при даних значеннях потенціал Юкави моделює Леннард-Джонсівську суміш $Ar - Kr$, властивості якої досліджені іншими авторами з допомогою комп'ютерної техніки. $T^* = 1$ відповідає температурі 120К, а $\eta = 0,393$ взяте таке ж як і в [6], для кращої можливості порівняння результатів.

На рис.1-рис.3 представлені криві $S_{ij}^0(\mathbf{k})$ для суміші твердих сфер при різних значеннях концентрації ($x = 0.5, 0.35$) і співвідношень між діаметрами ($\alpha = 1, 0.9$). Спадання величини α , як видно з рис.1-рис.2, веде до зменшення висоти основних піків. Зміна концентрації має вплив на характер взаєморозташувань кривих S_{11} і S_{22} .

Рис.4-рис.5 – парціальні структурні фактори при різних значеннях r для "симетричної" Юкава-суміші. "Симетричною" називається суміш, для якої $\alpha = 1, q = 1, x = 0.5$. Відчутний вплив коефіцієнт "неподібної" взаємодії має лише на довгохвильові значення і дещо на висоту основних піків. Структура суміші при варіації r суттєво не міняється.

Схожа ситуація і при зміні q . Попарне порівняння рис.4 і рис.6, рис.5 і рис.7, де q відповідно дорівнює 1 і 2, дає змогу побачити, що висота основних піків зростає при збільшенні коефіцієнта "подібної" взаємодії.

Як і для результатів, поданих в [7], включення далекосяжного притягання в нашій моделі веде до росту основних піків (див. рис.1 і рис.4).

На рис.8, рис.9 зображені парціальні структурні фактори еквімолярної суміші при різних значеннях приведеної температури T^* . Легко бачити, що ріст температури веде до зменшення висоти піків. Такий ж висновок роблять і автори в [8], що проводили свої дослідження методом молекулярної динаміки.

На рис.10, рис.11 показана залежність $S_{ij}(\mathbf{k})$ при $\alpha \neq 1$, тобто при різних значеннях діаметрів частинок і концентрації. Зміна α і x суттєво впливає на характер поведінки $S_{ij}(\mathbf{k})$.

Рис.12 і рис.14 показують поведінку $S_{cc}(0)$, як функції $1/T^*$, при різних значеннях r . Бачимо, що $S_{cc}(0)$ при підході до температури спінодалі різко починає зростати. При $r = 1.414$ крива $S_{cc}(0)$ свого максимуму досягає при вищих температурах, аніж при $r = 2$. Аналогічні криві при $z^* = 1.8$ зображені в статті [6]. Порівняння дає добру узгодженість характеру поведінки і чисельних даних.

На рис.13, рис.15 подані залежності температур спінодалі T^* від r при $z^* = 2.45$, $z^* = 1.8$. Можна припустити, що різний нахил гілок кривої відповідає різній природі фазового переходу: газ-рідина або розшарування. При малих значеннях r більший вплив має взаємодія між частинками одного і того ж сорту, в системі спостерігатиметься фазовий перехід розшарування. Коли r зростає система має більшу тенденцію до фазового переходу газ-рідина, бо частинки різних сортів взаємодіють сильніше, аніж частинки однакових. Аналогічна залежність $T^*(r)$ поражена методами Монте-Карло та інтегральних рівнянь [8] для $T^* = 1$ і $z^* = 2.45$ дає $r = 1.25 \pm 0.05$ і $r = 1.08$ відповідно. У випадку використання нашого підходу $r = 1.17$.

В таб.1, таб.2 подані залежності термодинамічних величин $S_{cc}(0)$ і "а" еквімолярної суміші частинок однакових діаметрів в залежності від зміни z^* і r . ($T^* = 1, \eta = 0.393$). Слід зауважити більш плавну зміну результатів наших досліджень на відміну від результатів ССН.

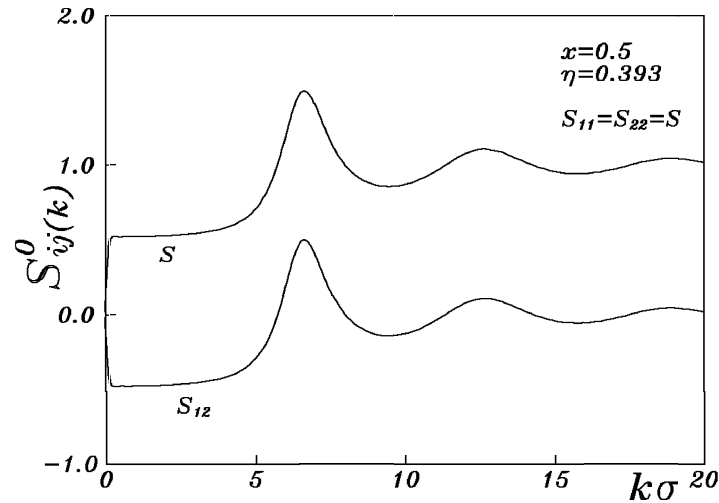


Рис. 1: Парціальні структурні фактори $S_{ij}^0(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер при $\alpha = 1$.

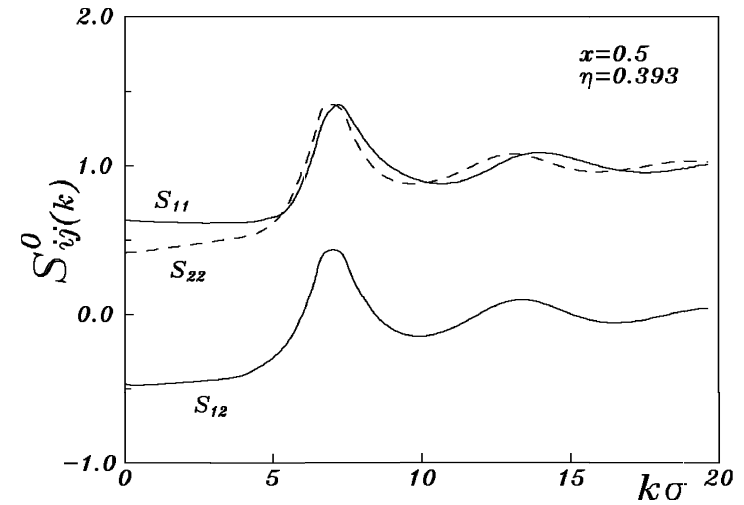


Рис. 2: Парціальні структурні фактори $S_{ij}^0(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер при $\alpha = 0.9$.

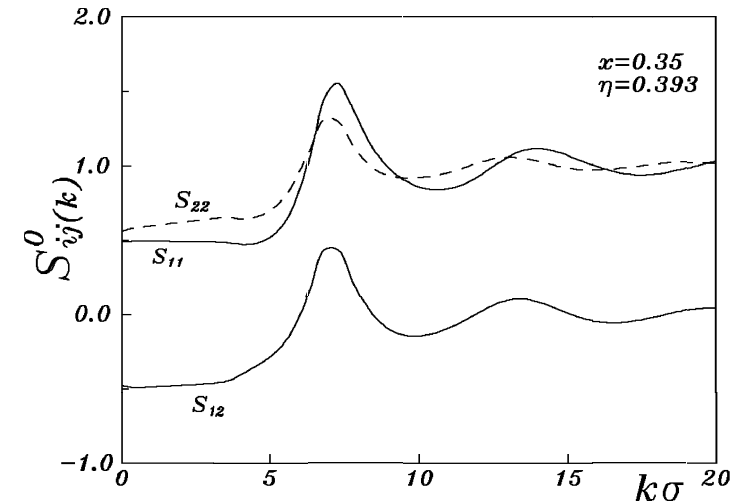


Рис. 3: Парціальні структурні фактори $S_{ij}^0(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер при $\alpha = 0.9, x = 0.35$.

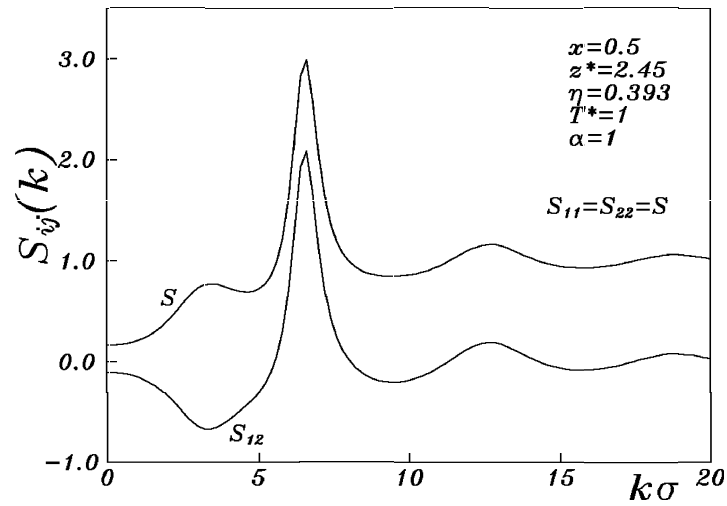


Рис. 4: Парціальні структурні фактори $S_{ij}(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер, взаємодіючих через потенціал Юкави при $q = 1, r = 2$.

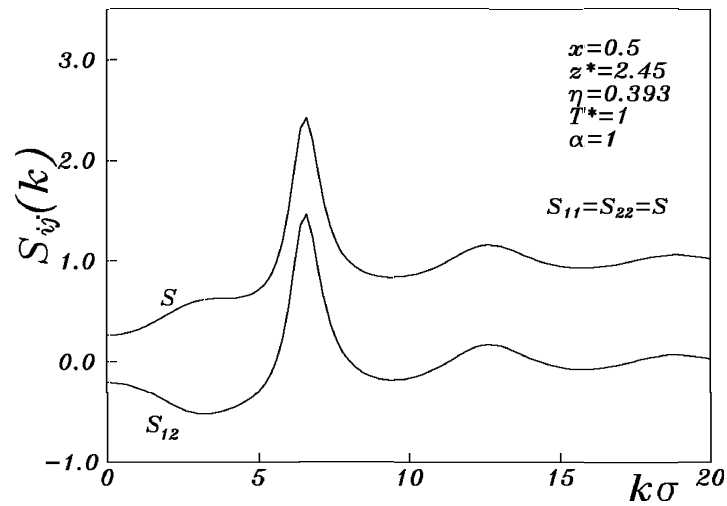


Рис. 5: Парціальні структурні фактори $S_{ij}(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер, взаємодіючих через потенціал Юкави при $q = 1, r = 1.414$.

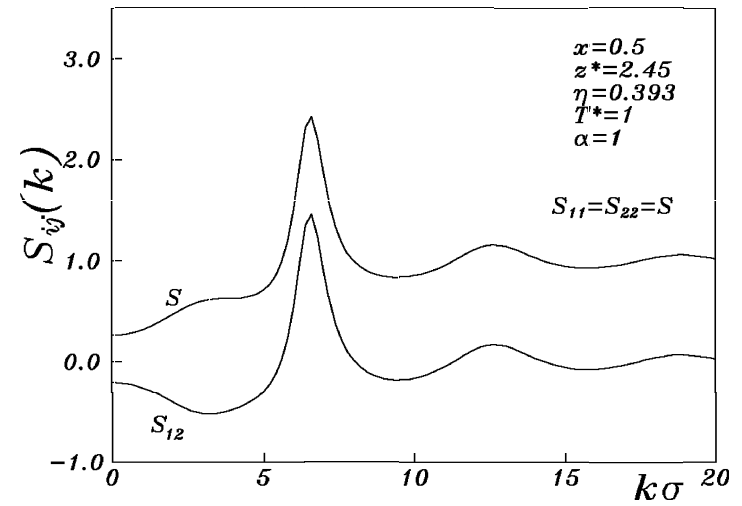


Рис. 6: Парціальні структурні фактори $S_{ij}(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер, взаємодіючих через потенціал Юкави при $q = 2, r = 2$.

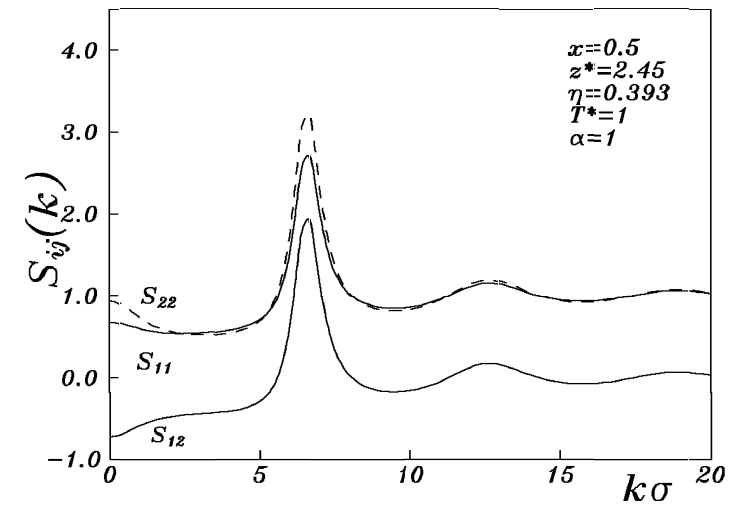


Рис. 7: Парціальні структурні фактори $S_{ij}(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер, взаємодіючих через потенціал Юкави при $q = 2, r = 1.414$.

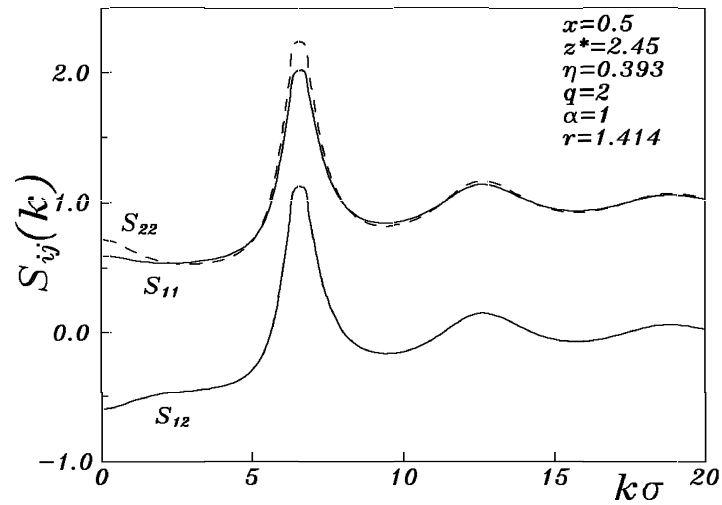


Рис. 8: Парціальні структурні фактори $S_{ij}(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер, взаємодіючих через потенціал Юкави при $T^* = 1.5$.

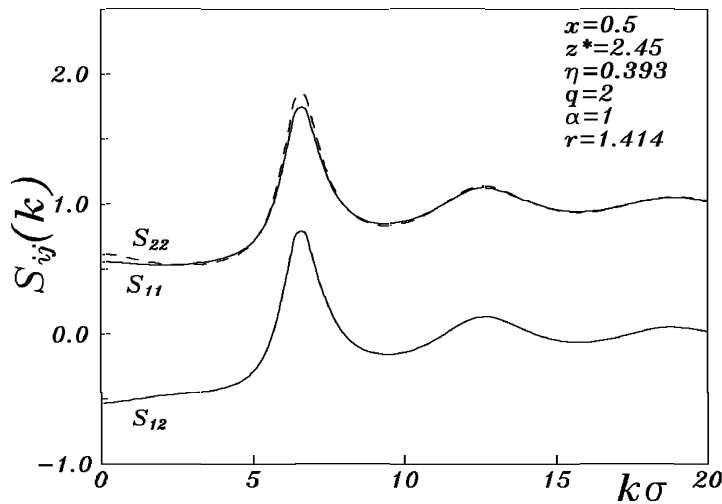


Рис. 9: Парціальні структурні фактори $S_{ij}(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер, взаємодіючих через потенціал Юкави при $T^* = 2.5$.

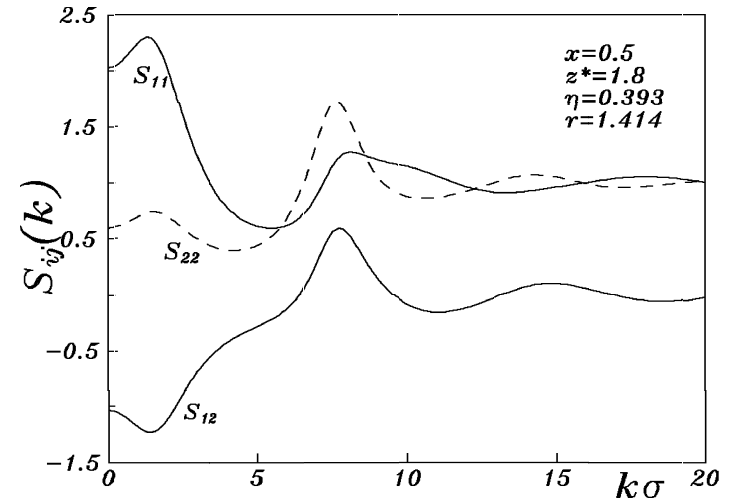


Рис. 10: Парціальні структурні фактори $S_{ij}(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер, взаємодіючих через потенціал Юкави при $T^* = 2.5$, $\alpha = 0.7$, $q = 0.7$.

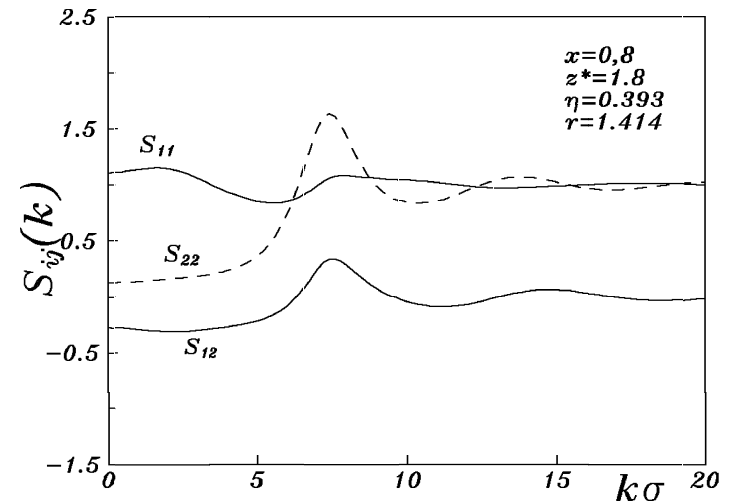
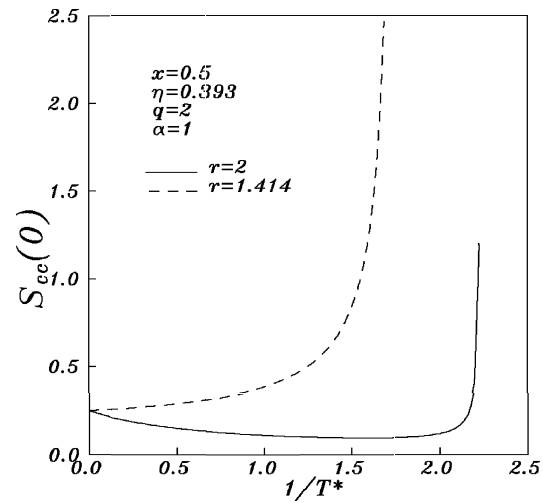
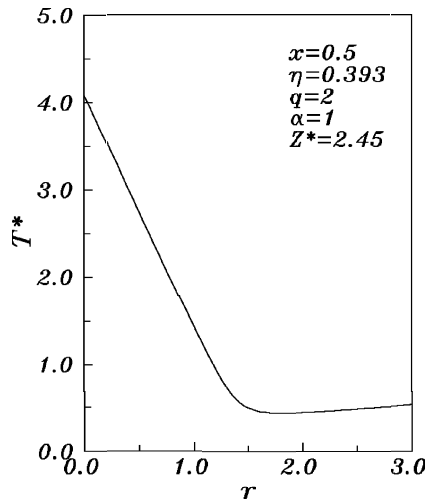
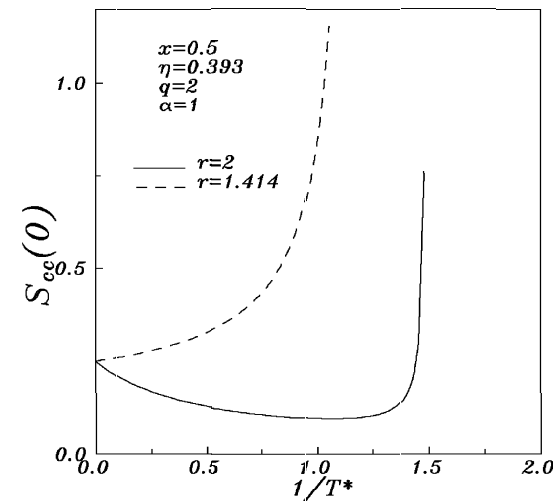
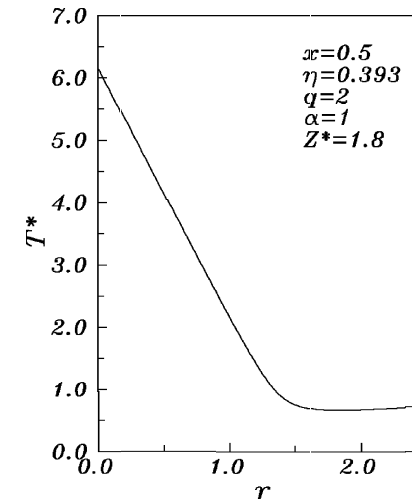


Рис. 11: Парціальні структурні фактори $S_{ij}(\mathbf{k})$ суміші твердих сфер, взаємодіючих через потенціал Юкави при $T^* = 2.5$, $\alpha = 0.7$, $q = 0.7$, $x = 0.8$.

Рис. 12: $S_{cc}(0)$, як функція $1/T^*$ при різних значеннях r ; $z^*=2.45$.Рис. 13: Залежність температур спінодалі T^* від коефіцієнта "не-подібної" взаємодії r .Рис. 14: $S_{cc}(0)$, як функція $1/T^*$ при різних значеннях r ; $z^*=1.8$.Рис. 15: Залежність температур спінодалі T^* від коефіцієнта "не-подібної" взаємодії r .

r	q	x	z^*	$S_{cc}(0)$	a
1.414	2	0.5	1.80	0.856	11.621
1.414	2	0.5	1.88	0.677	12.299
1.414	2	0.5	1.96	0.579	12.908
1.414	2	0.5	2.04	0.517	13.458
1.414	2	0.5	2.12	0.475	13.957
1.414	2	0.5	2.20	0.444	14.411
1.414	2	0.5	2.28	0.420	14.826
1.414	2	0.5	2.36	0.402	15.206
1.414	2	0.5	2.44	0.387	15.556
1.414	2	0.5	2.52	0.374	15.879
1.414	2	0.5	2.60	0.364	16.178
1.414	2	0.5	2.68	0.355	16.456
1.414	2	0.5	2.76	0.348	16.714
1.414	2	0.5	2.84	0.341	16.954
1.414	2	0.5	2.92	0.336	17.179

Табл. 1: Термодинамічні властивості еквімолярної суміші при різних значеннях z^* ($T^*=1$, $\eta=0.393$, $\alpha=1$).

q	z^*	x	r	$S_{cc}(0)$	a
2	2.45	0.5	1.20	3.411	16.178
2	2.45	0.5	1.30	0.730	15.907
2	2.45	0.5	1.40	0.409	15.636
2	2.45	0.5	1.50	0.284	15.365
2	2.45	0.5	1.60	0.218	15.094
2	2.45	0.5	1.70	0.176	14.823
2	2.45	0.5	1.80	0.148	14.552
2	2.45	0.5	1.90	0.128	14.281
2	2.45	0.5	2.00	0.112	14.010
2	2.45	0.5	2.10	0.100	13.739
2	2.45	0.5	2.20	0.091	13.468
2	2.45	0.5	2.30	0.083	13.197
2	2.45	0.5	2.40	0.076	12.926
2	2.45	0.5	2.50	0.070	12.654
2	2.45	0.5	2.60	0.065	12.383
2	2.45	0.5	2.70	0.061	12.112
2	2.45	0.5	2.80	0.057	11.841
2	2.45	0.5	2.90	0.054	11.570
2	2.45	0.5	3.00	0.051	11.299
2	2.45	0.5	3.10	0.048	11.028
2	2.45	0.5	3.20	0.046	10.757

Табл. 2: Термодинамічні властивості еквімолярної суміші при різних значеннях r ($T^*=1$, $\eta=0.393$, $\alpha=1$).

Література

- [1] Юхновский И.Р., Головкин М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. Киев: Наукова думка, 1980.
 - [2] Хилл Т. Статистическая механика: Принципы избранные положения. М., ИИЛ, 1960.
 - [3] Пацаган О.В., Фазові переходи в бінарних системах. 1. Наближення хаотичних фаз. Препринт ІФКС НАН України: ІФКС-92-2У, Львів, 1992, 28 с.
 - [4] Пацаган О.В., Юхновский И.Р., Функционал большой статистической суммы в методе коллективных переменных с выделенной системой отсчета. Многокомпонентная система // ТМФ, т.83, No 1, с. 72-82.
 - [5] Lebowitz J.L., Exact solution of generalized Percus-Yevick equation for a mixture of hard spheres // Phys.Rev., 1964, vol.133, No 4A, p.895-899.
 - [6] Abramo M.C., Caccamo C., Giunta G., Phase stability of fluid hard sphere mixtures interacting through an attractive Yukawa tail // Phys.Rev. A, 1986, vol.34, No 4, p. 3279-3287.
 - [7] Harder J.M., Silbert M., Binary mixture of hard spheres with attractive square-well interaction between unlike spheres // J. Chem. Phys., 1980, vol.75, No 3, p.571-574.
 - [8] Rey C., Halleo L.J., Honzaes L.E., Honzaes D.J., The demixing and gas-liquid instability of a binary Yukawa fluid // J. Chem. Phys., 1992, vol.97, No 7, p.5121-5125.
 - [9] Hoheisel C., Zhang R., Structure and phase-separation behavior of Yukawa mixtures studied by the mean-spherical approximation and computer calculations // Phys.Rev. A, 1991, vol.43, No 10, p.5332-5336.
 - [10] Пацаган О.В., До теорії фазових переходів // УФЖ, 1992, т. 37, No 4, с.582-589.
-

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Оксана Вадимівна Пацаган
Роман Степанович Мельник

ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРНИХ І ТЕРМОДИНАМІЧНИХ
ВЛАСТИВОСТЕЙ БІНАРНОЇ СУМІШІ ТВЕРДИХ СФЕР, ЩО
ВЗАЄМОДІЮТЬ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦІАЛ ЮКАВИ

Роботу отримано 12 травня 1996 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу статистичної теорії
конденсованих систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені