
ИССЛЕДОВАНИЕ ЧАСТОТНОЙ ДИСПЕРСИИ КОЭФФИЦИЕНТОВ СДВИГОВОЙ И ОБЪЕМНОЙ ВЯЗКОСТИ ЖИДКОГО АРГОНА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПАРАМЕТРОВ СОСТОЯНИЯ

С. ОДИНАЕВ, Х. МИРЗОАМИНОВ

УДК 532.7;532.12; 536.22
©2010

Таджикский технический университет им. М.С. Осими
(Ул. Академика Раҷабовых, 10, Душанбе 734042; e-mail: odsb@tarena-tj.org)

Приведен краткий анализ экспериментальных и теоретических работ по исследованию коэффициентов сдвиговой $\eta_S(\omega)$ и объемной $\eta_V(\omega)$ вязкости простых жидкостей, а также оптимальный выбор потенциала межмолекулярного взаимодействия $\Phi(|\mathbf{r}|)$ и радиальной функции распределения $g(|\mathbf{r}|)$. Последние используются для определения коэффициента трения β и времени релаксации τ и τ_0 , в зависимости от температуры T и плотности ρ , а также проведения численных расчетов коэффициентов вязкости $\eta_S(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$ в широком интервале изменения параметров состояния и частот. Полученные результаты находятся в количественном удовлетворительном согласии с теоретическими и экспериментальными литературными данными для жидкого аргона.

1. Введение

Исследование неравновесных свойств и структуры жидкостей тесно связано с изучением природы внутренних релаксационных процессов и явлений переноса в них. Последние сопровождаются наличием диссипативных явлений, которые описываются посредством коэффициентов переноса и соответствующих им модулей упругости. Наиболее хорошо экспериментально исследуемыми как статическими, так и динамическими коэффициентами переноса являются коэффициенты диффузий, сдвиговой вязкости, теплопроводности, и электропроводности, а также акустические параметры скорости и поглощения звуковых волн, в широком интервале изменения термодинамических параметров состояния и частот [1–3]. Однако коэффициент объемной вязкости, модуль сдвиговой и объемной упругости, термо- и эле-

ктроупругости прямыми экспериментальными измерениями определить невозможно. Их определяют косвенным образом с помощью измерения других коэффициентов или физических параметров. Так, например, коэффициент объемной вязкости η_V определяют с помощью измерения избыточного поглощения звуковых волн в жидкостях [4–8]. Точность определения η_V в жидкостях [4–6], из-за ошибок измерения коэффициента поглощения звука α , а также вследствие погрешности используемых данных о термодинамических и кинетических свойствах жидкостей (плотности ρ , скорость звука C , теплоемкостей c_P и c_V , сдвиговая вязкость η_S и теплопроводности λ), недостаточна для получения четких эмпирических закономерностей и их сопоставления с теорией.

Полученные экспериментальные значения η_V и η_S при $\nu = 5 \cdot 10^6$ Гц для жидкого Ar в работе [7], сопоставлены с теоретическими результатами П. Грейя [3]. Последние на 70–90% создаются двумя вкладками, один из которых обусловлен “жесткой” частью потенциала взаимодействия на межчастичном расстоянии $r = \sigma$, а второй, “структурный” вклад, обусловлен дальнедействующими силами и также связан с искажением парной функции распределения на расстояниях $r > \sigma$. Экспериментальные значения η_V и η_S снижаются по линии насыщения при больших значениях плотности ρ (низких T и высоких P), причем температурный интервал тем больше, чем выше давление P . Участок снижения функции $\eta_V(T)_P$ длиннее и круче для более высоких изобар ($P = \text{const}$), что обуславливает пересечение последних друг с другом и с пограничной кривой $\eta_V(T)_H$.

Показано, что при $T \geq 140$ К на линии насыщения для жидкого Ar, обнаружена зависимость α/ν^2 от частоты ν , т.е. частотная дисперсия поглощения звука обусловлена вкладами кинетических коэффициентов вязкости, исследование которых представляет большой интерес.

В работе [7] проанализированы и сделаны попытки определения взаимосвязи между характерными временами релаксации объемной τ_V и сдвиговой вязкости τ_S , с временами установления равновесных распределений в конфигурационной τ_q и импульсной τ_p частях фазового пространства. Высоочастотные разложения автокорреляторов потока импульса в выражениях Грина–Кубо для коэффициентов вязкости [9] дают предельные значения объемного K_0 , K_∞ и сдвигового μ_∞ модулей упругости, посредством которых определяются времена релаксации τ_V и τ_S . Последние являются временами затухания автокорреляторов для диагональных и недиагональных элементов тензора потока импульса в экспоненциальном приближении. Если, следуя [10], считать допустимым разложение автокорреляторов на независимо релаксирующие потенциальную и кинетическую части, а также предположение о том, что времена τ_q и τ_p определяют экспоненциальное затухание каждой части, тогда, согласно [7], оба коэффициента η_V и η_S вязкости могут быть выражены через одни и те же времена затухания τ_q и τ_p . Там же сделаны попытки оценить последние независимым образом, если рассматривать τ_q как время затухания автокоррелятора средней силы $\tau_q \approx \tau_{(|F^2|)} \approx \frac{3kT}{(|F^2|)} \beta$, а τ_p из определений коэффициента самодиффузии, предполагая экспоненциальную временную зависимость автокоррелятора скорости $\tau_p \approx \tau_{(|v^2|)} \approx m/\beta$. В этом случае для определения τ_q и τ_p необходимо знать зависимость коэффициента трения β жидкости от параметров состояния (температуры T , плотности ρ и давления P), которая по настоящее время остается открытой.

Методом молекулярной динамики [11–14] численно рассчитаны частотно-зависимые кинетические коэффициенты и соответствующие им модули упругости простых жидкостей в широком интервале изменения термодинамических параметров состояния и частот. Низкочастотное поведение коэффициентов переноса простых жидкостей характеризуется особенностью типа точки возврата (т.е. асимптотики) пропорциональной $\omega^{1/2}$. Анализ этой особенности показывает, что временная автокорреляционная функция микроскопических напряжений имеет “дальние хвосты” при больших временах типа $t^{-3/2}$ и что амплитуда этого хвоста существенно больше значения, выте-

кающего из теоретических оценок соответствующих кинетических вкладов.

Теоретическому исследованию явлений переноса, упругих и акустических свойств жидкостей на основе как модельных, так и молекулярно-кинетической теорий посвящено много работ [1–3, 15–17]. В различных приближениях получены аналитические выражения коэффициентов переноса, упругих и акустических параметров жидкостей, которые учитывают вклады внутренних релаксационных процессов, выражаются посредством потенциала взаимодействия между структурными единицами жидкостей и радиальной функцией распределения, а также других молекулярных параметров среды.

На основе кинетических уравнений для одно- и двухчастичной функций распределения в [18] получены аналитические выражения для динамических коэффициентов сдвиговой $\eta_S(\omega)$ и объемной $\eta_V(\omega)$ вязкости и проведены численные расчеты для жидкого аргона в широком диапазоне частот. Однако во всех расчетах значение коэффициента трения β принималось постоянным $\beta = 2,85 \cdot 10^{-13}$ кг/с, т.е. не учитывалась зависимость β от термодинамических параметров состояния, а в радиальной функции распределения пренебрегали плотностной зависимостью, так как нас интересовало частотное поведение кинетических коэффициентов. Чтобы улучшить согласие теоретически вычисленных значений с экспериментальными результатами коэффициентов β , η_S и η_V , а также время релаксации тензора напряжения в импульсном и конфигурационном пространстве, следует оптимально выбрать реальные межмолекулярные потенциалы взаимодействия $\Phi(|\mathbf{r}|)$ и радиальную функцию распределения $g(|\mathbf{r}|)$, однако этот вопрос до настоящего времени остается открытым.

В работах [19, 20] были предприняты попытки на основе оптимального выбора двух модифицированных потенциалов Леннард–Джонса и потенциала Букингейма, а также с учётом температурной и плотностной зависимости радиальной функции распределения, теоретически вычислить коэффициент трения β , времена релаксации τ , τ_0 и коэффициент сдвиговой вязкости $\eta_S(\omega)$ для жидкого аргона в широком интервале изменения температуры T и плотности ρ . Полученные результаты были сравнены с теоретическими данными П. Грейя [3] и экспериментальными результатами [7]. Анализ численных расчетов сдвиговой вязкости $\eta_S(\omega)$ показывает, что наиболее удовлетворительное согласие теоретических и экспериментальных результатов получается с помощью модифицированного потенциала межмолекулярного взаи-

модействия для реальных жидкостей, предложенного Дж. Роулинсоном в работе [3], где потенциал притяжения принимался почти в два раза меньше коэффициента r^{-6} в потенциале Леннард-Джонса. Следовательно, принимая эту оптимальную модель за основу, в настоящей работе исследованы динамические коэффициенты сдвиговой $\eta_S(\omega)$ и объемной $\eta_V(\omega)$ вязкости в широком интервале изменения температуры T и плотности ρ , численные значения которых взяты из работы [7]. При этом коэффициент трения β , время релаксации тензора напряжения в импульсном пространстве τ и феноменологический параметр τ_0 , являющийся аналогом времени диффундирующей молекулы, которые содержатся в потенциальных частях коэффициентов $\eta_S(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$, определяются на основе данной модели самосогласованно, в зависимости от ρ и T .

2. Выбор модели и исходные выражения коэффициентов вязкости

В качестве исходных воспользуемся аналитическими выражениями динамических коэффициентов сдвиговой $\eta_S(\omega)$ и объемной $\eta_V(\omega)$ вязкости, полученных на основе кинетических уравнений для одно- и двухчастичной функций распределения с учетом пространственной корреляции плотности в конфигурационном пространстве, которые имеют следующий вид [17, 18]:

$$\eta_S(\omega) = \frac{n k T \tau}{1 + (\omega \tau)^2} + \frac{2 \pi n^2 \sigma^3}{15} \int_0^\infty dr r^3 \frac{d\Phi(|\mathbf{r}|)}{dr} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} G_1(r, r_1, \omega) \frac{\partial g(|\mathbf{r}_1|)}{\partial r_1} r_1 d\mathbf{r}_1, \quad (1)$$

$$\eta_V(\omega) = \frac{2 \pi n^2 \sigma^3}{3} \int_0^\infty dr r^3 \frac{d\Phi(|\mathbf{r}|)}{dr} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} G_1(r, r_1, \omega) \varphi_0(|\mathbf{r}_1|) d\mathbf{r}_1, \quad (2)$$

$$G_1(r, r_1, \omega) = \frac{\tau_0 (2 \omega \tau_0)^{-1/2}}{4 \pi r r_1} \left[e^{-\varphi_1} (\sin \varphi_1 - \cos \varphi_1) - \right.$$

$$\left. - e^{-\varphi_2} (\sin \varphi_2 - \cos \varphi_2) \right], \quad (3)$$

где

$$\varphi_0(|\mathbf{r}_1|) = \frac{r_1}{3} \frac{\partial g(r_1)}{\partial r_1} - \left[n \left(\frac{\partial g(r_1)}{\partial n} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g(r_1)}{\partial T} \right)_n \right],$$

$$\gamma = \frac{1}{nc_V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho,$$

$$\varphi_1 = \varphi_1(r, r_1, \omega) = \left(\frac{\omega \tau_0}{2} \right)^{-1/2} (r - r_1);$$

$$\varphi_2 = \varphi_2(r, r_1, \omega) = \left(\frac{\omega \tau_0}{2} \right)^{1/2} (r + r_1),$$

$\tau = m/(2\beta)$; $\tau_0 = \beta \sigma^2 / 2kT$; $m, \sigma, n = \frac{N}{V}$, $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1$, $r = r_{12}/\sigma$ – масса, диаметр, числовая плотность, взаимное и приведенное взаимное расстояния между частицами жидкости соответственно; β – коэффициент трения; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; ω – циклическая частота процесса.

Формулы (1)–(3) описывают динамическое поведение вязкостных свойств жидкостей в широком диапазоне частот. Первый (кинетический) член сдвиговой вязкости $\eta_S(\omega)$ учитывает вклад трансляционной релаксации, т.е. релаксации вязкого тензора напряжения в импульсном пространстве, характерное время которого равно $\tau = m/(2\beta)$. Частотная зависимость коэффициентов $\eta_S(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$ вязкости, в основном, описывается посредством пространственно-временного поведения фундаментального решения (функция Грина) уравнения Смолуховского для бинарной плотности в конфигурационном пространстве $G_1(r, r_1, \omega)$.

Функция $G_1(r, r_1, \omega)$ является сложным математическим выражением и характеризует процесс восстановления равновесной структуры по диффузионному закону в конфигурационном пространстве, но не позволяет выделить явное характерное время релаксации. Процесс структурной релаксации имеет непрерывный спектр времен и только в приближении экспоненциального закона затухания релаксирующих потоков можно получить аналог времени τ_q работы [7]. Феноменологический параметр τ_0 содержится в (3) сложным образом. Наличие функции $G_1(r, r_1, \omega)$ позволяет определить значения $\eta_S(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$ во всем частотном диапазоне, а также асимптотическое поведение этих коэффициентов при низких частотах $\sim \omega^{1/2}$, совпадающее с результатами, полученными

методом молекулярной динамики [11–14] и при высоких частотах $\sim \omega^{-1}$.

Для определения коэффициентов $\eta_S(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$, согласно выражениям (1)–(3), необходимо знать молекулярные параметры жидкости, такие как, например, масса m , диаметр σ частицы, а также глубина потенциальной ямы ε . Однако, при исследовании коэффициентов $\eta_S(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$ вязкости на основе кинетических уравнений, имеются трудности вследствие невозможности определения коэффициента трения β жидкостей в рамках рассмотренной теории. Правые части кинетических уравнений, которые обеспечивают необратимость этих уравнений во времени (например, в нашем случае оператор столкновения Фоккера–Планка), описывают диссипативные процессы в жидкостях, содержат коэффициент трения β . В статье [3], путем определения автокорреляционной функции импульсов и нахождения средней силы, действующей на пробную частицу, движущуюся с постоянной скоростью, приведено выражение для коэффициента трения в виде

$$\beta^2 = (4\pi/3) \rho \sigma \int_0^\infty \nabla^2 \Phi(|\mathbf{r}|) g(|\mathbf{r}|) r^2 dr, \quad (4)$$

где ρ – плотность жидкости; $\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$ – радиальная часть оператора Лапласа; $\Phi(|\mathbf{r}|)$ – модифицированный потенциал Леннард–Джонса, с сильным отталкивательным членом, как потенциал твердых сфер; r – безразмерное взаимное расстояние. Следовательно, изучение природы и определение зависимости как коэффициента трения β , так и коэффициентов вязкостей $\eta_S(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$ от параметров состояния (плотности ρ , температуры T и давления P), требуют выбора наиболее оптимального потенциала межмолекулярного взаимодействия $\Phi(|\mathbf{r}|)$ и радиальной функции распределения $g(r)$.

Следуя результатам работ [19, 20], в качестве исходной модели $\Phi(|\mathbf{r}|)$ и функции $g(|\mathbf{r}|)$, принимаем следующие выражения:

$$\Phi(|\mathbf{r}|) = \begin{cases} \infty, & \text{при } r < \sigma, \\ 4\varepsilon [r^{-12} - 0,5r^{-6}], & \text{при } r \geq \sigma, \end{cases} \quad (5)$$

$$g(|\mathbf{r}|) = y(\rho^*) \exp(-\Phi(|\mathbf{r}|)/kT), \quad (6)$$

где $y(\rho^*) = (2 - \rho^*)/2(1 - \rho^*)^3$ – функция Карнахана–Старлинга, $\rho^* = (\pi/6) N_0 \sigma^3 \rho/M$ – приведенная плотность; N_0 – число Авогадро; M – молярная масса; ρ – плотность жидкости.

Учитывая формулы (5) и (6) в выражениях (1)–(4), для определения и проведения численных расчетов коэффициентов трения β и вязкостей $\eta_S(\omega)$, $\eta_V(\omega)$, получаем следующие выражения:

$$\beta^2 = (192M\varepsilon/N_0\sigma^2)\rho^* \times \int_0^\infty r^{-6} (22r^{-6} - 2,5) g(r) dr, \quad (7)$$

$$\eta_S(\omega) = 6\varepsilon\tau\rho^*T^*/\pi\sigma^3(1 + \omega^{*2}) - \frac{(24)^3}{5\pi} \frac{\varepsilon\tau_0}{\sigma^3} \left(\frac{\rho^{*2}}{T^*}\right) \int_0^\infty dr r^{-5} (2r^{-6} - 0,5) \times \int_0^r G_1^*(r, r_1, \omega) r_1^{-5} (2r_1^{-6} - 0,5) g(r_1) dr_1, \quad (8)$$

$$\eta_V(\omega) = \frac{48}{\pi} \frac{\varepsilon\tau_0}{\sigma^3} \rho^{*2} T^* (I_1 + I_2), \quad (9)$$

где

$$I_1 = -\frac{96}{T^{*2}} \int_0^\infty dr r^{-5} (2r^{-6} - 0,5) \times \int_0^r G_1^*(r, r_1, \omega) r_1^{-5} (2r_1^{-6} - 0,5) g(r_1) dr_1,$$

$$I_2 = \frac{12}{T^*} \int_0^\infty dr r^{-5} (2r^{-6} - 0,5) \times$$

$$\int_0^r G_1^*(r, r_1, \omega) [y_2(\rho^*) + \gamma\Phi^*(r_1)] g(r_1) r_1 dr_1,$$

$$G_1^*(r, r_1, \omega) = \frac{4\pi r r_1}{\tau_0} G_1(r, r_1, \omega) =$$

$$= \frac{1}{\alpha} [e^{-\varphi_1} (\sin \varphi_1 - \cos \varphi_1) - e^{-\varphi_2} (\sin \varphi_2 - \cos \varphi_2)],$$

Т а б л и ц а 1

T, К	ρ , кг/м ³	P, атм	η_S , мПа·с			η_V , мПа·с			η_V/η_S		
			[3]	[7]	наст. работа	[3]	[7]	наст. работа	[3]	[7]	наст. работа
90	1380	1,32	0,171	0,235	0,239	0,252–0,116	0,156	0,231	1,474	0,663	0,967
128	1120	50	0,073	0,096	0,086	0,093	0,170	0,075	1,274	1,771	0,872
133,5	1120	100	0,073	0,084	0,087	0,097	0,165	0,077	1,329	1,964	0,885
185,5	1120	500	0,087–0,077	0,092	0,097	0,112	–	0,089	1,287	–	0,918

$$\gamma = \frac{c_P}{c_V} = \frac{K_S}{K_T}; \quad y_2(\rho^*) = \rho^*(5 - 2\rho^*)/(1 - \rho^*)(2 - \rho^*);$$

$$\alpha = \sqrt{2\omega\tau_0} = \sqrt{2\omega^* \frac{\tau_0}{\tau}};$$

$$\varphi_1 = \varphi_1(r, r_1, \omega) = \frac{\alpha}{2}(r - r_1);$$

$$\varphi_2 = \varphi_2(r, r_1, \omega) = \frac{\alpha}{2}(r + r_1),$$

$T^* = kT/\varepsilon$ – приведенная температура; ε – значение потенциала $\Phi(|\mathbf{r}|)$ в точке $r = r_{\min}$; $\omega^* = \omega\tau = \omega m/2\beta$ – приведенная частота.

Таким образом, полученные аналитические выражения (7)–(9) позволяют теоретическое исследование и проведение численных расчетов кинетических коэффициентов сдвиговой $\eta_S(\omega)$ и объемной $\eta_V(\omega)$ вязкости жидкостей в зависимости от параметров состояния в широком диапазоне частот.

3. Результаты численных расчетов

На основе выражений (7)–(9) с учетом формул (5) и (6) проведены численные расчеты коэффициентов сдвиговой $\eta_S(\omega)$ и объемной $\eta_V(\omega)$ вязкости для жидкого Ag в зависимости от термодинамических параметров состояния (ρ, T, P) в широком диапазоне частот. Значения температуры T (86–140 К) плотности ρ и давления P взяты из работы [7]. При вычислении τ , τ_0 , $\eta_S(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$ коэффициент трения β определялся согласно формуле (7) в приближении твердых шаров [20]. В табл. 1 приведены теоретические результаты, полученные нами для изочастотных $\nu^* = 10^{-6}$ ($\nu \sim 10^6$) Гц сдвиговой $\eta_S(\omega)$ и объемной $\eta_V(\omega)$ вязкости, и сравненные с теоретическими данными П. Грейя [3], а также с экспериментальными результатами табл. 4 из работы [7], при разных значениях температуры, плотности и давления жидкого Ag.

Рассчитанные нами значения $\eta_S(\omega), \eta_V(\omega)$ и величина η_V/η_S лучше согласуются с экспериментальными результатами [7], чем теоретические данные

П. Грейя [3]. Следует отметить, что значения величины η_V/η_S как функции ρ, T и P , согласно нашим вычислениям находятся в интервале 0,872–0,967. Это обусловлено правильным учетом вкладов структурной релаксации, так как согласно [1,2], данный интервал составляет величины порядка $\eta_V/\eta_S \approx 0,5$ –10.

В табл. 2 приведены результаты наших теоретических расчетов $\eta_S(\omega)$, $\eta_V(\omega)$ и величины η_V/η_S для жидкого Ag при $\nu^* = 10^{-6}$ в интервале температур $86 \leq T \leq 140$ К и разных плотностях, а также сравнены с экспериментальными значениями этих коэффициентов и $\langle \eta_V \rangle$ из работы [7].

Из табл. 2 видно, что полученные нами данные для $\eta_S(T)_\rho$ и $\eta_S(\rho)_T$ хорошо количественно согласуются с экспериментальными результатами. Для каждой изотермы наблюдается рост $\eta_S(\rho)_T$, а для изохор уменьшение $\eta_S(T)_\rho$. Полученные нами значения $\eta_V(T)_\rho$, $\eta_V(\rho)_T$ и экспериментальные результаты, а также $\langle \eta_V(T)_\rho \rangle$ и $\langle \eta_V(\rho)_T \rangle$ согласно [7], находятся в удовлетворительном согласии. Следует отметить, что при низких температурах наши данные немного завышены, а по мере роста температуры количественное согласие улучшается. Значения величин $\frac{\eta_V}{\eta_S}(T)$ и $\frac{\eta_V}{\eta_S}(\rho)$ во всем интервале изменения температуры и плотности составляют 0,707–1,005, когда их экспериментальные значения порядка 0,559–3,892. При низких температурах и больших плотностях как экспериментальные, так и теоретические значения η_V/η_S одного порядка и количественно совпадают. При больших температурах $T \geq 130$ К, экспериментальные значения η_V/η_S растут, в связи с ростом η_V и уменьшением η_S , когда теоретически вычисленные нами значения η_V/η_S почти остаются постоянными и равными 0,707–0,938 в этом интервале температур, так как с ростом температуры T как η_S , так и η_V уменьшаются.

В работе [7] отмечено, что при $T \geq 140$ К на линии насыщения для жидкого Ag была обнаружена зависимость α/ν^2 от ν , которая обусловлена частотной дисперсией коэффициентов переноса. В связи с этим, на основе (5)–(7) при фиксированных значе-

Т а б л и ц а 2

T, K	$\rho,$ кг/м ³	$\eta_S, \text{мПа}\cdot\text{с}$		$\eta_V, \text{мПа}\cdot\text{с}$			η_V/η_S		
		[7]	наст. работа	[7]	$\langle\eta_V\rangle,$ [7]	наст. работа	[7]	$\langle\eta_V\rangle/\eta_S,$ [7]	наст. работа
86	1402	0,272	0,271	0,152	0,163	0,262	0,559	0,599	0,970
	1407	0,276	0,276	0,163	0,168	0,269	0,591	0,609	0,975
	1413	0,280	0,282	0,174	0,177	0,277	0,621	0,632	0,981
	1419	0,283	0,289	0,185	0,185	0,285	0,654	0,654	0,987
90	1377	0,235	0,236	0,153	0,161	0,228	0,651	0,685	0,964
	1383	0,239	0,241	0,155	0,162	0,234	0,649	0,678	0,970
	1390	0,242	0,248	0,168	0,171	0,242	0,694	0,707	0,977
	1396	0,245	0,254	0,180	0,182	0,249	0,735	0,743	0,983
	1405	0,250	0,262	0,193	0,193	0,260	0,772	0,772	0,992
	1418	0,255	0,276	0,211	0,211	0,277	0,827	0,827	1,005
100	1312	0,180	0,173	0,156	0,157	0,165	0,867	0,872	0,952
	1319	0,183	0,178	0,152	0,155	0,171	0,831	0,847	0,959
	1327	0,186	0,183	0,155	0,156	0,177	0,833	0,839	0,967
	1334	0,189	0,188	0,161	0,160	0,183	0,852	0,847	0,974
	1347	0,194	0,197	0,172	0,172	0,195	0,887	0,887	0,986
	1362	0,199	0,209	0,188	0,188	0,209	0,945	0,945	1,001
110	1240	0,144	0,130	0,167	0,154	0,121	1,160	1,069	0,930
	1248	0,148	0,134	0,160	0,150	0,125	1,081	1,014	0,938
	1258	0,151	0,139	0,149	0,144	0,131	0,987	0,954	0,948
	1268	0,155	0,144	0,151	0,150	0,138	0,974	0,968	0,958
	1286	0,162	0,153	0,166	0,159	0,150	1,025	0,981	0,976
	1303	0,169	0,163	0,175	0,175	0,162	1,036	1,036	0,993
120	1160	0,113	0,098	0,184	0,167	0,087	1,628	1,478	0,888
	1164	0,114	0,099	0,174	0,165	0,089	1,526	1,447	0,893
	1181	0,119	0,105	0,161	0,156	0,096	1,353	1,311	0,911
	1195	0,123	0,111	0,156	0,153	0,102	1,268	1,244	0,926
	1219	0,130	0,119	0,163	0,163	0,112	1,254	1,254	0,947
	1241	0,137	0,130	0,169	0,169	0,127	1,234	1,234	0,974
130	1065	0,086	0,072	0,191	0,189	0,059	2,221	2,198	0,811
	1092	0,088	0,079	0,179	0,175	0,067	2,034	1,989	0,844
	1113	0,092	0,085	0,165	0,161	0,074	1,793	1,750	0,869
	1149	0,099	0,096	0,163	0,163	0,087	1,646	1,646	0,910
	1175	0,105	0,104	0,164	0,164	0,098	1,562	1,562	0,938
135	1031	0,075	0,066	0,222	0,221	0,051	2,960	2,947	0,781
	1037	0,076	0,067	0,195	0,194	0,053	2,566	2,553	0,789
	1065	0,079	0,073	0,170	0,166	0,060	2,152	2,101	0,824
Для линии насыщения оценки не проводились									
140	968	0,065	0,055	0,253	0,253	0,039	3,892	3,892	0,707
	1011	0,068	0,063	0,198	0,193	0,048	2,912	2,838	0,765
	1065	0,073	0,074	0,176	0,176	0,062	2,411	2,411	0,835
	1103	0,077	0,084	0,169	0,169	0,074	2,195	2,195	0,881

ниях температуры T и плотности ρ , были проведены исследования частотной зависимости коэффициентов сдвиговой $\eta_S(\nu)$ и объемной $\eta_V(\nu)$ вязкости в широ-

ком интервале приведенных частот $\nu^* = 10^{-6} - 1$ ($\nu \sim 10^6 - 10^{12}$ Гц). Результаты приведены в табл. 3, и сравнены со статическими экспериментальными

Т а б л и ц а 3

T, К	ν^* $\rho, \text{кг/м}^3$	$\eta_S, \text{мПа}\cdot\text{с}$					$\eta_V, \text{мПа}\cdot\text{с}$				
		[7]	10^{-6}	10^{-4}	10^{-2}	1	[7]	10^{-6}	10^{-4}	10^{-2}	1
86	1402	0,272	0,271	0,262	0,188	0,011	0,152	0,262	0,265	0,252	0,017
	1407	0,276	0,276	0,267	0,191	0,011	0,163	0,269	0,272	0,257	0,017
	1413	0,280	0,282	0,273	0,195	0,011	0,174	0,277	0,280	0,263	0,018
	1419	0,283	0,289	0,279	0,199	0,012	0,185	0,285	0,288	0,270	0,018
90	1377	0,235	0,236	0,229	0,171	0,011	0,153	0,228	0,231	0,225	0,017
	1383	0,239	0,241	0,235	0,174	0,011	0,155	0,234	0,237	0,231	0,017
	1390	0,242	0,248	0,241	0,178	0,011	0,168	0,242	0,245	0,237	0,017
	1396	0,245	0,254	0,246	0,182	0,012	0,180	0,249	0,252	0,243	0,018
	1405	0,250	0,262	0,255	0,187	0,012	0,193	0,260	0,263	0,251	0,018
	1418	0,255	0,276	0,268	0,195	0,012	0,211	0,277	0,280	0,264	0,018
100	1312	0,180	0,173	0,170	0,135	0,011	0,156	0,165	0,167	0,169	0,016
	1319	0,183	0,178	0,174	0,138	0,011	0,152	0,171	0,173	0,174	0,016
	1327	0,186	0,183	0,179	0,142	0,011	0,155	0,177	0,180	0,180	0,016
	1334	0,189	0,188	0,184	0,145	0,011	0,161	0,183	0,186	0,185	0,017
	1347	0,194	0,197	0,193	0,152	0,011	0,172	0,195	0,197	0,195	0,017
	1362	0,199	0,209	0,204	0,159	0,012	0,188	0,209	0,211	0,207	0,018
110	1240	0,144	0,130	0,128	0,107	0,010	0,167	0,121	0,122	0,125	0,014
	1248	0,148	0,134	0,132	0,109	0,010	0,160	0,125	0,127	0,129	0,015
	1258	0,151	0,139	0,136	0,113	0,010	0,149	0,131	0,133	0,134	0,015
	1268	0,155	0,144	0,141	0,117	0,010	0,151	0,138	0,139	0,140	0,015
	1286	0,162	0,153	0,151	0,124	0,011	0,166	0,150	0,151	0,151	0,016
	1303	0,169	0,163	0,160	0,131	0,011	0,175	0,162	0,164	0,161	0,017
120	1160	0,113	0,098	0,097	0,083	0,009	0,184	0,087	0,088	0,089	0,012
	1164	0,114	0,099	0,098	0,084	0,009	0,174	0,089	0,089	0,091	0,013
	1181	0,119	0,105	0,104	0,089	0,009	0,161	0,096	0,097	0,098	0,013
	1195	0,123	0,111	0,109	0,093	0,009	0,156	0,102	0,103	0,104	0,014
	1219	0,130	0,119	0,117	0,099	0,010	0,163	0,112	0,113	0,113	0,014
	1241	0,137	0,130	0,128	0,108	0,010	0,169	0,127	0,127	0,125	0,015
130	1065	0,086	0,072	0,072	0,064	0,007	0,191	0,059	0,059	0,060	0,010
	1092	0,088	0,079	0,078	0,069	0,008	0,179	0,067	0,067	0,067	0,011
	1113	0,092	0,085	0,084	0,073	0,008	0,165	0,074	0,074	0,074	0,011
	1149	0,099	0,096	0,094	0,082	0,009	0,163	0,087	0,087	0,086	0,013
	1175	0,105	0,104	0,103	0,089	0,009	0,164	0,098	0,098	0,096	0,013
135	1031	0,075	0,066	0,065	0,059	0,007	0,222	0,051	0,052	0,052	0,009
	1037	0,076	0,067	0,066	0,060	0,007	0,195	0,053	0,053	0,053	0,009
	1065	0,079	0,073	0,072	0,065	0,007	0,170	0,060	0,061	0,060	0,010
Для линии насыщения оценки не проводились											
140	968	0,065	0,055	0,055	0,050	0,006	0,253	0,039	0,039	0,039	0,008
	1011	0,068	0,063	0,062	0,056	0,006	0,198	0,048	0,048	0,048	0,009
	1065	0,073	0,074	0,073	0,065	0,007	0,176	0,062	0,062	0,061	0,010
	1103	0,077	0,084	0,083	0,073	0,008	0,169	0,074	0,074	0,071	0,011

значениями $\eta_S(\nu)$ и $\eta_V(\nu)$, полученными в [7] при $\nu = 5 \cdot 10^6$ Гц.

Теоретические результаты, приведенные в табл. 3, показывают, что область частотной дисперсии $\eta_S(\nu)$

и $\eta_V(\nu)$ имеет место при $\nu^* = 10^{-6} - 1$ ($\nu \sim 10^6 - 10^{12}$) Гц, т.е. в широком диапазоне частот, который является наличием вклада структурной релаксации, когда согласно общей релаксационной теории, эта область

составляет примерно 10^2 Гц по закону затухания этих коэффициентов $\sim \nu^{-2}$, а в нашем случае $\sim \nu^{-1}$.

Таким образом, результаты теоретических исследований и сравнение численных расчетов с экспериментальными данными коэффициентов вязкости $\eta_S(\nu)$ и $\eta_V(\nu)$ жидкого аргона, в рамках выбранной модели потенциала межмолекулярного взаимодействия $\Phi(|\mathbf{r}|)$ и радиальной функции распределения $g(|\mathbf{r}|)$, находятся в удовлетворительном согласии как качественно, так и количественно. Хорошее согласие наблюдается при низких температурах и высоких плотностях жидкого аргона. Следовательно, на основе этой модели можно исследовать вязкостные, упругие и акустические свойства простых жидкостей в широком интервале параметров состояния и вблизи тройной точки.

1. И.Г. Михайлов, В.А. Соловьев, Ю.П. Сырников, *Основы молекулярной акустики* (Наука, Москва, 1964).
2. *Физическая акустика: Свойства газов, жидкостей и растворов, т. 2, ч. А*, под ред. У. Мэзона (Мир, Москва, 1968).
3. *Физика простых жидкостей, том 1, 2*, под ред. Г. Темперли и др. (Мир, Москва, 1971, 1973).
4. D.G. Naugle, J. Chem. Phys. **44**, 741 (1966).
5. D.G. Naugle, J.H. Lunsford, and J.R. Singer, J. Chem. Phys. **45**, 4669 (1966).
6. D.S. Swyt, J.F. Navlice, and E.F. Carome, J. Chem. Phys. **47**, 1199 (1967).
7. С.А. Михайленко, Б.Г. Дударь, В.А. Шмидт, ФНТ **1**, 224 (1975).
8. P. Malbrunot, A. Boyer, E. Charles, and H. Abachi, Phys. Rev. A **27**, 1523 (1983).
9. R. Zwanzig and R.D. Mountain, J. Chem. Phys. **43**, 4464 (1965).
10. Э.Т. Брук-Левинсон, В.В. Немцов, Л.А. Ротт, Акуст. журн. **16**, 206 (1970).
11. А.Н. Лагарьков, В.М. Сергеев, УФН **125**, 409 (1978).
12. Д. Эванс, Г. Хенли, З. Гесс, *Физика за рубежом* (Мир, Москва, 1986).
13. D.J. Evans and G.P. Morris, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids* (Academic Press, London, 1990).
14. M.P. Allen and D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford, 1991).
15. Я.И. Френкель, *Кинетическая теория жидкостей. Собр. избр. трудов* (Москва – Ленинград, 1959).
16. Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд, *Молекулярная теория газов и жидкостей* (Иностранная литература, Москва, 1961).

17. С. Одинаев, А.А. Адхамов, *Молекулярная теория структурной релаксации и явлений переноса в жидкостях* (Дониш, Душанбе, 1998).

18. А.А. Адхамов, С. Одинаев, УФЖ **29**, 1517 (1984).

19. С. Одинаев, Х. Мирзоаминов, ДАН РТ **52**, 854 (2009).

20. С. Одинаев, Д. Акдодов, Х. Мирзоаминов, ДАН РТ **52**, 928 (2009).

Получено 16.02.10

ВИВЧЕННЯ ЧАСТОТНОЇ ДИСПЕРСІЇ КОЕФІЦІЄНТІВ ЗСУВНОЇ І ОБ'ЄМНОЇ В'ЯЗКОСТІ РІДКОГО АРГОНУ ЗАЛЕЖНО ВІД ПАРАМЕТРІВ СТАНУ

С. Одинаев, Х. Мирзоаминов

Резюме

Наведено короткий аналіз експериментальних і теоретичних робіт по вивченню коефіцієнтів зсувної η_S та об'ємної η_V в'язкості простих рідин, а також оптимальний вибір потенціалу міжмолекулярної взаємодії $\Phi(|\mathbf{r}|)$ й радіальної функції розподілу $g(|\mathbf{r}|)$. Останні використовуються для визначення коефіцієнта тертя β і часу релаксації τ та τ_0 , залежно від температури T і щільності ρ , а також проведення безлічі розрахунків коефіцієнтів в'язкості $\eta_S(\omega)$ і $\eta_V(\omega)$ у широкому інтервалі зміни параметрів стану і частот. Отримані результати знаходяться в кількісному задовільному узгодженні з теоретичними і експериментальними літературними даними для рідкого аргону.

FREQUENCY DISPERSION OF THE SHEAR AND BULK VISCOSITY COEFFICIENTS OF LIQUID ARGON AS FUNCTIONS OF STATE PARAMETERS

S. Odinaev, Kh. Mirzoaminov

M. Osimi Tajik Technical University
(10, Academician Rajabovuykh Str., Dushanbe 734042, Tajikistan;
e-mail: odsb@tarena-tj.org)

Summary

Experimental and theoretical works studying the shear η_S and bulk η_V viscosity coefficients of simple liquids and the optimal choice of the intermolecular interaction potential $\Phi(|\mathbf{r}|)$ and the radial distribution function $g(|\mathbf{r}|)$ are briefly analyzed. The last are used to determine the friction coefficient β and the relaxation times τ and τ_0 as functions of the temperature T and the density ρ , as well as to numerically calculate the viscosity coefficients $\eta_S(\omega)$ and $\eta_V(\omega)$ in wide ranges of state parameters and frequencies. The obtained results are in satisfactory quantitative agreement with the theoretical and experimental data for liquid argon reported in the literature.