ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ ДЛЯ КОЛЕКТИВНИХ МОД В ДИНАМІЦІ ПРОСТИХ ТА СКЛАДНИХ РІДИН

І.М. МРИГЛОД, В.М. КУПОРОВ

Інститут фізики конденсованих систем НАН України
(Вул. Свєнціцького 1, Львів 79011; e-mail: slw@ph.icmp.lviv.ua)

УДК 53.01, 532.5, 538.9

Формалізм теорії збурень використано для обчислення поправок до узагальнених колективних мод, викликаних слабкими перехресними кореляціями між тепловими та в'язкопружними динамічними процесами в простих та складних рідинах. Збудовано загальне формулювання такої теорії збурень до другого порядку включно. Проведено її апробацію на відомих найпростіших динамічних моделях рідин та виконано аналіз отриманих результатів порівняно з точними результатами для цих моделей. Показано, що результати теорії збурень дозволяють за відповідних умов відтворити відомі результати для цих моделей.

При вивченні природи динамічних процесів у простих та складних рідинах важливим завданням є дослідження їх колективної динаміки і знаходження спектрів колективних мод, що характеризують основні типи колективних процесів у системі. На гідродинамічному рівні опису за основу вибирають базис динамічних змінних, що включає у себе густини всіх консервативних величин, тобто густину числа частинок $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ (парціальні густини складових $\hat{n}_{\mathbf{k},\alpha}$ у випадку багатокомпонентної рідини), густину потоку $\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}$ та густину повної енергії $\hat{e}_{\mathbf{k}}$, які у просторі фур'є-образів визначаються так:

$$\hat{n}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V}\sum_{j=1}^{N} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j),$$

$$\hat{e}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V}\sum_{j=1}^{N} e_j \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) = \frac{1}{V}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{p_j^2}{2m} + \sum_{l\neq j} V_{jl}\right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j},$$

$$\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V}\sum_{j=1}^{N} m\dot{\mathbf{r}}_j \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j).$$

Часова похідна густини частинок пов'язана з густиною потоку, а саме його проекцію $\hat{J}_{\mathbf{k}}$ на хвильовий вектор $\mathbf{k}$ (поздовжня компонента):

$$\dot{\hat{n}}_{\mathbf{k}} = iL_N\hat{n}_{\mathbf{k}} = \frac{i\mathbf{k}}{m}\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}} = \frac{ik}{m}\hat{J}_{\mathbf{k}}.$$

Тут фігурують $\mathbf{r}_j$ – просторові координати j-ї частинки, імпульс $\mathbf{p}_j = m\dot{\mathbf{r}}_j$; m, e_j – маса та енергія частинки відповідно, потенціал парної взаємодії V_{jl}, а iL_N – оператор Ліувіля N-частинкової для системи.

Як показують дослідження, гідродинамічна модель часто виявляється недостатньою для коректного опису рідин [1–3] і не може пояснити деякі результати експерименту та чисельних досліджень. Це, зокрема, стосується зміни швидкості звуку в рідинах та густих газах, а саме – спостереження явища швидкого звуку в [4–6], а також позитивної (або негативної) дисперсії звуку [7, 8]; появи пропагаторних осциляційних мод в іонних системах [1] тощо.

У цьому випадку більш адекватний опис реалізується на розширених моделях, що крім гідродинамічних змінних включають до розгляду їх похідні по часу або вищі потоки, зокрема, похідну потоку густини (парціальних потоків), густини енергії і т. п. Наприклад, термов'язкоеластична модель у простих рідинах будується на змінних

$$\{n_{\mathbf{k}}, \dot{n}_{\mathbf{k}}, e_{\mathbf{k}}\} + \{\ddot{n}_{\mathbf{k}}, \dot{e}_{\mathbf{k}}\}$$

або для багатокомпонентних рідин маємо відповідно:

$$\{n_{\mathbf{k},\alpha}, J_{\mathbf{k},\alpha}, e_{\mathbf{k}}\} + \{\dot{J}_{\mathbf{k},\alpha}, \dot{e}_{\mathbf{k}}\}.$$

Водночас, при включенні великої кількості додаткових динамічних змінних, система рівнянь макродинаміки стає досить складною для аналітичного розгляду. Щоправда у деяких випадках можна знехтувати перехресними кореляціями, вважаючи їх слабкими. Тоді складна динамічна модель розпадається на декілька простіших, для яких неважко обчислити аналітично спектр власних колективних мод, і часто такі моделі можуть доволі точно в певних діапазонах хвильового числа описувати основні процеси у системі. Прикладом цьому можуть бути області парціальної і когерентної динаміки [9], виявлені у бінарних сумішах.

Якщо перехресні кореляції у певній області хвильових векторів і частот стають малими, то спрощені моделі, у яких ними нехтують, дозволяють зрозуміти фізичний механізм формування мод і дають корисну інформацію для інтепретації експериментів. Проте інколи необхідно враховувати також і поправки до колективних мод, що виникатимуть при врахуванні слабких перехресних кореляцій, зокрема, між енергією та парціальними густинами, енергією та потоками густин, потоком густини та потоком імпульсу. Оскільки спектр колективних мод системи для спрощених моделей – без урахування перехресних кореляцій – легко знайти аналітично, то виникає ідея щодо розвитку та використання відповідної теорії збурень. На ідейному рівні така задача є близькою до стаціонарної теорії збурень у квантовій механіці.

При цьому за точну незбурену задачу можна розглядати задачу на колективні моди для системи без перехресних кореляцій, для яких кінетична матриця складається з кількох менших за розміром блоків, для кожного з яких можна незалежно шукати власні значення і власні вектори. Очевидно, що власні вектори різних блоків незбуреної задачі будуть між собою ортогональними. За збурення кінетичної матриці вибирають матрицю такого ж порядку, що й вихідна кінетична матриця, у якій на місцях перехресть між блоками стоятимуть відповідні перехресні корелятори статичної чи динамічної природи, якими в незбуреній матриці нехтують, а всі інші елементи будуть нульовими.

Побудувати загальне формулювання такої теорії збурень, а також продемонструвати, як вона працює у випадках деяких простих динамічних моделей рідин – є завданням цієї роботи.

1. Узагальнена гідродинамічна матриця і спектр колективних збуджень

Задача на обчислення спектра колективних збуджень системи $\{z_\alpha(k)\}$ у методі узагальнених колективних мод зводиться до задачі на власні значення та власні вектори узагальненої гідродинамічної (кінетичної) матриці $\mathbf{T}(k)$ [1, 2]:

$$\mathbf{T}(k)\hat{\mathbf{X}}(k) = \hat{\mathbf{X}}(k)\hat{z}(k), \tag{1}$$

яка містить два внески $\mathbf{T}(k) = -i\Omega(k) + \tilde{\Phi}(k,0)$, де $i\Omega(k)$ та $\tilde{\Phi}(k,z)$ є, відповідно, частотна матриця та матриця функцій пам'яті системи, $\hat{z}(k)$ – діагональна матриця із власних значень: $z_{\alpha\beta}(k) = \delta_{\alpha\beta} z_\alpha(k)$. Частотну матрицю розраховують через статичні рівноважні кореляційні функції як

$$i\Omega(k) = \langle iL\mathbf{P}_{\mathbf{k}}\mathbf{P}_{-\mathbf{k}}\rangle\langle\mathbf{P}_{\mathbf{k}}\mathbf{P}_{-\mathbf{k}}\rangle^{-1}.$$

У симетризованій формі, про що буде докладно сказано далі, вона є антиермітовою, а отже, дає лише уявні внески у власні значення $z_\alpha(k)$, які описують характерні частоти пропагаторних осциляційних мод. Матриця функцій пам'яті

$$\tilde{\Phi}(k,z) = \langle(1-\mathcal{P})iL_N\mathbf{P}_{\mathbf{k}}\times$$

$$\times(z+(1-\mathcal{P})iL_N)^{-1}(1-\mathcal{P})iL_N\mathbf{P}_{-\mathbf{k}}\rangle\langle\mathbf{P}_{\mathbf{k}}\mathbf{P}_{-\mathbf{k}}\rangle^{-1}$$

у симетризованій формі є ермітовою і має лише дійсні власні значення, причому всі одного знака [10], що забезпечує згасання часових кореляційних функцій з часом. Тут $\mathbf{P}_{\mathbf{k}}$ – це набір базових динамічних змінних, який використовують для опису системи, $\langle ...\rangle$ – рівноважне статистичне усереднення, $\mathcal{P} = \langle ...\mathbf{P}_{-\mathbf{k}}\rangle\langle\mathbf{P}_{\mathbf{k}}\mathbf{P}_{-\mathbf{k}}\rangle^{-1}\mathbf{P}_{\mathbf{k}}$ – це проекційний оператор Морі. Знайдені власні значення $z_\alpha(k)$ дають спектр колективних мод системи, розрахований у межах певної динамічної моделі, що визначається набором $\{\mathbf{P}_{\mathbf{k}}\}$, а відповідні їм власні вектори $\mathbf{x}_\alpha = \{\hat{X}_{i,\alpha}\}$ дають можливість розрахувати амплітуди цих мод, що описують внесок певної моди у часові кореляційні функції (ЧКФ):

$$F_{ij}(k,t) = \sum_{\alpha=1}^{s} G_\alpha^{ij}(k)\exp(z_\alpha(k)t), \tag{2}$$

де амплітуди $G_\alpha^{ij}(k)$ шукаємо як

$$G_\alpha^{ij}(k) = \sum_{l=0}^{s-1} \hat{X}_{i,\alpha}\hat{X}^{-1}_{\alpha,l}F_{lj}(k,0). \tag{3}$$

Якщо базис динамічних змінних $\mathbf{P_k}$ можна розбити на підкласи, перехресні кореляції між якими з певних фізичних міркувань вважаються малими, то задача на колективні моди спрощується і може бути розв'язана порівняно просто аналітично у нульовому наближенні за цими кореляціями. Елементи ж перехресних кореляцій, які вважаємо малими і які в нульовому наближенні не враховувалися, можна оцінити далі за допомогою теорії збурень у першому, другому і т. д. порядку за цими величинами.

Задача виглядає досить схожою на задачу стаціонарної теорії збурень у квантовій механіці, але якщо проаналізувати її уважніше, то виявляються суттєві і принципові відмінності. Перш за все – це неермітовість узагальненої гідродинамічної матриці, що веде в загальному випадку до неортогональності власних векторів, які відповідають різним власним значенням. Зауважимо, що ортогональність у квантовій механіці відіграє надзвичайно важливу роль при побудові формалізму теорії збурень. Тому для подальшої роботи варто більш детально розглянути властивості узагальненої гідродинамічної матриці. По-перше, для спрощення при обчисленнях колективних мод можна провести ортогоналізацію матриці статичних кореляційних функцій $\langle \mathbf{P_k P_{-k}} \rangle$, привівши її до діагональної форми. Така ортогоналізація може бути проведена за допомогою процедури Грама–Шмідта й техніки проекційних операторів [11].

По-друге, необхідно забезпечити ортогональність власних векторів, що відповідають різним власним значенням узагальненої гідродинамічної матриці, а також вирішити питання з нормуванням власних векторів, які є функціями k. Цього можна досягти шляхом додаткової симетризації узагальненої гідродинамічної матриці, що досягається перетворенням $\mathbf{P}^\alpha_\mathbf{k} \to \mathbf{P}^\alpha_\mathbf{k} / \langle \mathbf{P}^\alpha_\mathbf{k} \mathbf{P}^\alpha_\mathbf{k} \rangle^{1/2}$.

Для того щоб краще сформулювати загальну ідею і схему побудови теорії збурень для обчислення колективних мод, розглянемо простий приклад динамічної моделі рідини, що описується набором динамічних змінних, який включає у себе такі густини локальних інтегралів руху, як густина числа частинок $n_\mathbf{k}$, її перша похідна по часу (або густина потоку) і часова похідна густини потоку імпульсу, тобто $\{n_\mathbf{k}, \dot{n}_\mathbf{k}, \ddot{n}_\mathbf{k}\}$. Якщо знехтувати перехресними в'язкопружними кореляціями, то такий базис можна розбити на два підкласи змінних $\{n_\mathbf{k}, \dot{n}_\mathbf{k}\} + \{\ddot{n}_\mathbf{k}\}$, кожен із яких має свої незалежні власні значення і відповідні їм власні вектори. Для такої моделі можна перейти до симетризованого й ортогоналізованого базису [12]. Тоді узагальнена гідродинамічна матриця матиме вигляд

$$\mathbf{T}_0(k) = \begin{pmatrix} 0 & ic_Tk & 0 \\ ic_Tk & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\frac{c_\infty^2}{c_T^2} - 1)\frac{1}{\tau} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

У цьому випадку легко знаходимо власні значення, що відповідають двом звуковим комплексно-спряженим модам $z_\pm^{(0)} = \pm ic_Tk$ і одній релаксаційній моді $z_3^{(0)} = -(\frac{c_\infty^2}{c_T^2} - 1)\frac{1}{\tau}$. Тут c_T, c_∞ – це ізотермічна та високочастотна швидкості звуку, а τ – це кореляційний час для часової кореляційної функції густини. Ізотермічна швидкість звуку c_T визначається з рівності $c_T^2 k^2 = \langle \dot{n}_\mathbf{k} \dot{n}_\mathbf{-k} \rangle \langle n_\mathbf{k} n_\mathbf{-k} \rangle^{-1}|_{k\to 0} = (k_BT/mS_{nn}(0))k^2$, де $S_{nn}(k) = \langle n_\mathbf{k} n_\mathbf{-k} \rangle$ – статичний структурний фактор, який у границі $k \to 0$ зв'язаний із стисливістю системи; c_∞^2 – це так звана нульова або високочастотна швидкість звуку, яка враховує лише пружні ефекти (подібно як у твердому тілі) і визначається як $c_\infty^2 k^2 = \langle \ddot{n}_\mathbf{k} \ddot{n}_\mathbf{-k} \rangle \langle \dot{n}_\mathbf{k} \dot{n}_\mathbf{-k} \rangle^{-1}|_{k\to 0}$. Власні вектори, що відповідають цим модам, також неважко знайти і, нормуючи їх на 1, маємо $\mathbf{x}_3^{(0)} = (0, 0, 1)$, $\mathbf{x}_\pm^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mp 1, 1, 0)$. Очевидно, що усі вони є взаємно-ортогональні, але тут для нас важлива, насамперед, ортогональність вектора $\mathbf{x}_3^{(0)}$ до інших власних векторів. Як далі буде видно, вона є важливою для узагальнення цього простого прикладу і послідовної побудови теорії збурень.

Якщо включити перехресні кореляції, то узагальнену гідродинамічну матрицю можна записати у вигляді $\mathbf{T}(k) = \mathbf{T}_0(k) + \delta\mathbf{T}(k)$, де матриця збурення в симетризованому вигляді:

$$\delta\mathbf{T}(k) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ik\sqrt{c_\infty^2 - c_T^2} \\ 0 & -ik\sqrt{c_\infty^2 - c_T^2} & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

містить вираз $\sqrt{c_\infty^2 - c_T^2}$, який можна вважати малим при близьких значеннях c_∞ та c_T. При цьому виникає типова задача теорії збурень у матричній формі.

2. Загальне формулювання теорії збурень

Таким чином, загальна постановка задачі є такою: нас цікавить спектр власних значень та власні вектори узагальненої гідродинамічної матриці, яка може бути записана у вигляді суми двох доданків $\mathbf{T} =$

$\mathbf{T}_0 + \lambda\delta\mathbf{T}$, де $\mathbf{T}_0$ – матриця без врахування перехресних кореляцій, а λ – деякий формальний параметр, який вважається малим. Тоді задача на спектр власних значень і власних векторів для матриці $\mathbf{T}_0$ може бути розв'язана порівняно легко, а $\delta\mathbf{T}$ – це матриця перехресних кореляцій, які є малими і можуть бути враховані при обчисленні спектра власних значень та власних векторів матриці $\mathbf{T}$ за допомогою теорії збурень.

Отже, вважаючи перехресні кореляції між певними змінними малими, поправки до власних мод та відповідних їм власних векторів можна шукати у вигляді розкладу теорії збурень:

$$z_\alpha = z_\alpha^{(0)} + \lambda\delta z_\alpha^{(1)} + \lambda^2\delta z_\alpha^{(2)} + \ldots,$$

$$\mathbf{x}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha^{(0)} + \lambda\delta\mathbf{x}_\alpha^{(1)} + \lambda^2\delta\mathbf{x}_\alpha^{(2)} + \ldots.$$

Усі ці розклади можемо підставити у матричне рівняння (1) і з урахуванням

$$\mathbf{T}_0(k)\hat{\mathbf{X}}^{(0)}(k) = \hat{\mathbf{X}}^{(0)}(k)\hat{z}^{(0)}(k)$$

прирівняти вирази одного порядку малості у лівій та правій частині цього рівняння. Отримаємо ланцюжок лінійних рівнянь, подібно як у випадку стаціонарної теорії збурень у квантовій механіці, що дозволяє знайти поправки до власних значень і власних векторів, які викликані збуренням. Нагадаємо, що у процесі знаходження розв'язку у квантовій механіці важливим є те, що незбурені власні вектори, які відповідають різним власним значенням оператора гамільтона, є ортогональними, оскільки гамільтоніан є ермітовим. У випадку ж узагальненої гідродинамічної матриці таке твердження не є справедливим. Однак важливо, що для деяких власних векторів умову ортогональності буде виконано напевне, оскільки у цьому класі задач базис динамічних змінних можна умовно розбити на незалежні підкласи: $\{\mathbf{P_k}\} = \{\mathbf{P}^\mu_\mathbf{k}, \mathbf{P}^\nu_\mathbf{k}\}$, перехресні кореляції між якими не враховуються в нульовому наближенні. Так, у розглянутому раніше прикладі такими незалежними підкласами є $\mathbf{P}^\mu_\mathbf{k} = \{n_\mathbf{k}, \dot{n}_\mathbf{k}\}$, $\mathbf{P}^\nu_\mathbf{k} = \ddot{n}_\mathbf{k}$. Кожен з цих підкласів дає незалежний блок матриці, свої незалежні власні значення і відповідні їм власні вектори. Причому цілком очевидно, що власні вектори $\mathbf{x}_\alpha^{(0)}$ для різних підкласів будуть ортогональними, оскільки матимуть структуру $\mathbf{x}_\alpha^{(0)} = \{x_{1,\alpha}, \ldots, x_{\mu,\alpha}; 0, \ldots 0\}$ при $\alpha = 1, \ldots, \mu$ і $\mathbf{x}_\alpha^{(0)} = \{0, \ldots, 0; x_{\mu+1,\alpha}, \ldots, x_{\mu+\nu,\alpha}\}$ при $\alpha = \mu+1, \ldots, \mu+\nu$. Скалярний добуток таких векторів можна означити як $(\mathbf{x}_\alpha\mathbf{x}_\beta) = \sum_i x^*_{i,\alpha}x_{i,\beta}$, і довільна матриця $\mathbf{A}$ у представленні власних векторів матриці $\mathbf{T}^{(0)}$ визначається як $\bar{A}_{\alpha\beta} = (\mathbf{x}_\alpha\mathbf{A}\mathbf{x}_\beta) = \sum_{i,j} x^*_{i,\alpha}A_{ij}x_{j,\beta}$. Очевидно, матриця перехресних кореляцій $\delta\mathbf{T}$ у такому представленні завжди матиме нульову діагональ $\delta\bar{T}_{\alpha\alpha} = 0$, і навіть більше того: відмінними від нуля у ній будуть лише ті $\delta\bar{T}_{\alpha\beta}$, для яких α і β відповідають різним підкласам. Також варто визначити спряжену матрицю $\bar{T}^*_{\alpha\beta} = \sum_{i,j} x^*_{i,\beta}T_{ij}x_{j,\alpha}$. Повертаючись до наведеного вище прикладу, відзначимо, що там відмінними від нуля є лише $\delta\bar{T}_{3\alpha}$ та $\delta\bar{T}_{\alpha 3}$, $\alpha = 1, 2(+,-)$.

Отже, підставляючи розклади теорії збурень у рівняння (1), і зберігаючи члени до другого порядку включно, маємо

$$\mathbf{T}_0(k)\mathbf{x}_\alpha^{(0)}(k) = \mathbf{x}_\alpha^{(0)}(k)\hat{z}_\alpha^{(0)}(k), \tag{6}$$

$$\delta\mathbf{T}(k)\mathbf{x}_\alpha^{(0)}(k) + \mathbf{T}_0(k)\delta\mathbf{x}_\alpha^{(1)} =$$

$$= \mathbf{x}_\alpha^{(0)}(k)\delta\hat{z}_\alpha^{(1)}(k) + \delta\mathbf{x}_\alpha^{(1)}(k)\hat{z}_\alpha^{(0)}(k), \tag{7}$$

$$\delta\mathbf{T}(k)\delta\mathbf{x}_\alpha^{(1)}(k) + \mathbf{T}_0(k)\delta\mathbf{x}_\alpha^{(2)} =$$

$$= \delta\mathbf{x}_\alpha^{(1)}(k)\delta\hat{z}_\alpha^{(1)}(k) + \delta\mathbf{x}_\alpha^{(2)}(k)\hat{z}_\alpha^{(0)}(k) + \delta\mathbf{x}_\alpha^{(0)}(k)\hat{z}_\alpha^{(2)}(k). \tag{8}$$

Оскільки $\delta\mathbf{x}_\alpha^{(1)}$ без додаткових умов з (7) визначається неоднозначно, то можна додатково накласти умову нормування $(\mathbf{x}_\alpha\mathbf{x}_\alpha^{(0)}) = 1$, а у випадку нормування на одиницю незбурених власних векторів це приводить до того, що $(\mathbf{x}_\alpha^{(0)}\delta\mathbf{x}_\alpha^{(1)}) = 0$, $(\mathbf{x}_\alpha^{(0)}\delta\mathbf{x}_\alpha^{(2)}) = 0$. Домножуючи рівняння (7) на $\mathbf{x}_\alpha^{(0)}$ і враховуючи сказане вище, бачимо, що усі перші поправки до мод $\delta z_\alpha^{(1)} = 0$. Поправку першого порядку до власних векторів будемо шукати у вигляді $\delta\mathbf{x}_\alpha^{(1)} = \sum_\gamma a_{\alpha\gamma}\mathbf{x}_\gamma^{(0)}$, де $a_{\alpha\gamma}$ – невідомі коефіцієнти першого порядку малості. Підставляючи цей розклад у (7) та домножуючи його зліва скалярно на фіксоване $\mathbf{x}_\beta^{(0)}$ з іншого підкласу, неважко показати, що $\delta\bar{T}_{\alpha\beta} = a_{\beta\alpha}(z_\beta^{(0)} - z_\alpha^{(0)})$, а звідси маємо вираз для першої поправки до власних векторів:

$$\delta\mathbf{x}_\alpha^{(1)} = \sum_{\beta/} \frac{\delta\bar{T}_{\beta\alpha}}{z_\alpha^{(0)} - z_\beta^{(0)}}\mathbf{x}_\beta^{(0)}. \tag{9}$$

Проводячи подібні операції з рівнянням (8), можемо знайти другу поправку до власних значень:

$$\delta z_\alpha^{(2)} = \sum_{\beta/} \frac{\delta\bar{T}^*_{\alpha\beta}\delta\bar{T}_{\beta\alpha}}{z_\alpha^{(0)} - z_\beta^{(0)}}. \tag{10}$$

Тут β' означає, що підсумовування проводиться по β з іншого підкласу, ніж α. Умовою справедливості такої теорії збурень є, очевидно, вимога $|\delta\bar{T}_{\alpha\beta}| \ll |z_\alpha^{(0)} - z_\beta^{(0)}|$.

3. Найпростіші приклади застосування

Для ілюстрації сформульованого формалізму розглянемо з його допомогою декілька простих прикладів, що відповідають відомим динамічним моделям для простої рідини, для яких відомі аналітичні розв'язки.

3.1. Гідродинамічна модель

Гідродинамічну модель задають базисом змінних $\{n_{\mathbf{k}}, \dot{n}_{\mathbf{k}}, h_{\mathbf{k}}\}$, де густина ентальпії $h_{\mathbf{k}} = e_{\mathbf{k}} - \langle e_{\mathbf{k}} n_{-\mathbf{k}}\rangle \langle n_{\mathbf{k}} n_{-\mathbf{k}}\rangle^{-1} n_{\mathbf{k}}$ виникає замість густини енергії $e_{\mathbf{k}}$ внаслідок ортогоналізації базису густин консервативних змінних. Симетризована гідродинамічна матриця в границі малих k матиме вигляд

$$\mathbf{T}(k) = \begin{pmatrix} 0 & ic_T k & 0 \\ ic_T k & D_l k^2 & \phi_{\dot{n}h} - i\omega_{\dot{n}h} \\ 0 & \phi_{h\dot{n}} - i\omega_{h\dot{n}} & D_h k^2 \end{pmatrix}, \qquad (11)$$

де елементи матриці, що відповідають термов'язким перехресним кореляціям, включають як статичні корелятори (через елементи частотної матриці $\omega_{\dot{n}h}$, $\omega_{h\dot{n}}$), так і динамічні внески, що враховуються через елементи функцій пам'яті $\phi_{h\dot{n}}, \phi_{\dot{n}h}$, аналітичні вирази для яких відомі [2]. У симетризованому вигляді можна записати $\phi_{h\dot{n}} = -\phi_{\dot{n}h} = -ik^2\xi(k,0)/\sqrt{TC_V m}$ та $i\omega_{\dot{n}h} = -i\omega_{h\dot{n}} = ik(\alpha_P/\kappa_T)\sqrt{TV/\rho C_V}$, де фігурують граничні значення при $k \to 0$ узагальнених ізотермічної стисливості κ_T, коефіцієнта лінійного теплового розширення α_P та теплоємності C_V; негідродинамічний коефіцієнт переносу, так звана теплова в'язкість $\xi(k,0)\mid_{k\to 0} \to 0$; ρ – масова густина, T – термодинамічна температура.

У нульовому наближенні часто можна знехтувати перехресними кореляціями теплової густини з густиною числа частинок та її потоком, розбиваючи матрицю (11) на два доданки:

$$\mathbf{T}(k) = \mathbf{T}_0(k) + \delta\mathbf{T}(k),$$

де

$$\delta\mathbf{T}(k) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{\dot{n}h} - i\omega_{\dot{n}h} \\ 0 & \phi_{h\dot{n}} - i\omega_{h\dot{n}} & 0 \end{pmatrix}. \qquad (12)$$

Узагальнені колективні моди моделі з матрицею $\mathbf{T}_0(k)$ без перехресних кореляцій з точністю до k^2 будуть мати вигляд

$$z_\pm^{(0)} = -D_l k^2/2 \pm ic_T k, \quad z_3^{(0)} = -D_h k^2. \qquad (13)$$

Тут $D_h = (V/C_V)\lambda$, де C_V, λ – граничні значення узагальненої теплоємності $C_V(k)$ та узагальненої теплопровідності $\lambda(k,z)$ при $k \to 0$, $z = 0$, а D_l – це коефіцієнт поздовжньої в'язкості.

Легко знаходимо власні вектори незбуреної задачі, нормовані на одиницю: $\mathbf{x}_h^{(0)} = (0,0,1)$, $\mathbf{x}_\pm^{(0)} = (1/\sqrt{2})(\pm 1, 1, 0)$.

На наступному етапі перехресні кореляції можна включити, використовуючи теорію збурень. Очевидно, що із матричних елементів $\delta\bar{T}_{\alpha\beta}$ відмінними від нуля будуть лише $\delta\bar{T}_{3\alpha}$ та $\delta\bar{T}_{\alpha 3}$ при $\alpha = 1, 2(+,-)$.

Поправки другого порядку до мод згідно з (10) шукаємо як

$$\delta z_3^{(2)} = \sum_{\alpha=1}^{2} \frac{\delta\bar{T}_{3\alpha}^* \delta\bar{T}_{\alpha 3}}{z_3^{(0)} - z_\alpha^{(0)}},$$

$$\delta z_\alpha^{(2)} = \frac{\delta\bar{T}_{\alpha 3}^* \delta\bar{T}_{3\alpha}}{z_\alpha^{(0)} - z_3^{(0)}}, \qquad \alpha = 1, 2(+,-). \qquad (14)$$

Шукаючи з точністю до k^2 добуток $\delta\bar{T}_{3\alpha}\delta\bar{T}_{\alpha 3}$, маємо

$$\delta\bar{T}_{3\alpha}\delta\bar{T}_{\alpha 3} = -k^2 \left(\frac{\alpha_P}{\kappa_T}\right)^2 \frac{TV}{2\rho C_V}. \qquad (15)$$

Підставляючи (15) в (14) та враховуючи значення $z_\alpha^{(0)}$, знаходимо поправки до власних значень у другому порядку теорії збурень:

$$\delta z_3^{(2)} = -\frac{V^2 T\lambda}{2\rho C_V^2 c_T^2} \left(\frac{\alpha_P}{\kappa_T}\right)^2 k^2, \qquad (16)$$

$$\delta z_\pm^{(2)} = -\frac{V^2 T\lambda}{2\rho C_V^2 c_T^2} \left(\frac{\alpha_P}{\kappa_T}\right)^2 k^2 \pm i \left(\frac{\alpha_P}{\kappa_T}\right)^2 \frac{TV}{2\rho C_V c_T^2} c_T k, \qquad (17)$$

 ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2010. Т. 55, №11

а отже:

$$z_3 \simeq z_3^{(0)} + \delta z_3^{(2)} = -\frac{V\lambda}{C_V}\left(1 + \frac{VT}{2\rho C_V c_T^2}\left(\frac{\alpha_P}{\kappa_T}\right)^2\right)k^2, \tag{18}$$

$$z_\pm \simeq z_\pm^{(0)} + \delta z_\pm^{(2)} = -\left(\frac{D_l}{2} + \frac{V^2 T\lambda}{2\rho C_V^2 c_T^2}\left(\frac{\alpha_P}{\kappa_T}\right)^2\right)k^2 \pm$$

$$\pm i c_T k\left(1 + \left(\frac{\alpha_P}{\kappa_T}\right)^2 \frac{TV}{2\rho C_V c_T^2}\right). \tag{19}$$

Бачимо, що для звукових збурень і теплової релаксаційної моди поправка перенормовує коефіцієнти згасання $\sim k^2$. Крім цього, для звукових мод перенормовується швидкість звуку. Також неважко бачити, що в усіх виразах фігурує величина (α_P/κ_T), яка відіграє фактично роль малого параметра теорії збурень. Якщо згадати вираз для узагальненої ізотермічної стисливості $1/\kappa_T(k) = nk_BT/S_{nn}(k)$ і порівняти його з вищезгаданим виразом для ізотермічної швидкості звуку, то бачимо – між ними є простий зв'язок $1/\kappa_T = c_T^2/\rho$, $\rho = nm$. Це дає можливість переписати другий доданок у (17) і отримати явно множник перенормування швидкості звуку в (19) у добре відомій формі $\gamma = 1 + TV\alpha_P^2/\kappa_T C_V$. Тобто врахування перехресних кореляцій між флуктуаціями енергії і густини приводить до перенормування ізотермічної швидкості звуку в адіабатичну $c_s = c_T\sqrt{\gamma}$. При цьому нами використано співвідношення $\sqrt{1+x} \approx 1 + x/2$, що справедливе при малих x. Це означає, що теорія збурень для гідродинамічної моделі дає стандартний вигляд для звукових мод з адіабатичною швидкістю звуку:

$$z_\pm \simeq z_\pm^{(0)} + \delta z_\pm^{(2)} = -\Gamma k^2 \pm i c_s k, \tag{20}$$

де коефіцієнт затухання звуку $2\Gamma = D_l + (\gamma - 1)(V/C_V)\lambda$, а формальним параметром малості в теорії збурень у цьому випадку виступає величина $\gamma - 1 = (c_s^2 - c_T^2)/c_T^2$.

Якщо продовжити в гідродинамічних модах розклад за хвильовим числом до k^3, враховуючи в (13) поправку до швидкості звуку $c(k) = c_T\sqrt{1 - (D_l^2/4c_T^2)k^2}$, одержимо

$$z_\pm \simeq z_\pm^{(0)} + \delta z_\pm^{(2)} = -\Gamma k^2 \pm i c_s k\sqrt{1 - \frac{D_l^2}{4c_T^2}k^2}. \tag{21}$$

Щодо коефіцієнтів загасання, то, дивлячись на вирази (18), (19), спостерігаємо перенормування поздовжньої в'язкості і коефіцієнта загасання звуку та теплопровідності у виразах для відповідних мод, що спричинено включенням термов'язких кореляцій.

3.2. В'язкоеластична модель

Цю динамічну модель будують на базових змінних, що включають для простих рідин: парціальну густину числа частинок та дві її перші похідні по часу $\{n_{\mathbf{k}}, \dot{n}_{\mathbf{k}}, \ddot{n}_{\mathbf{k}}\}$. Змінна $\ddot{n}_{\mathbf{k}}$ описує зміну потоку імпульсу, а отже, враховує пружні ефекти. Реально таку модель можна використати для опису систем, де ефекти теплового розширення несуттєві, наприклад, у випадку деяких рідких металів. Ортогоналізація приводить до фізично еквівалентного базису $\{n_{\mathbf{k}}, \dot{n}_{\mathbf{k}}, n_{3,\mathbf{k}}\}$, де $n_{3,\mathbf{k}} = \ddot{n}_{\mathbf{k}} - \langle \ddot{n}_{\mathbf{k}} n_{-\mathbf{k}}\rangle\langle n_{\mathbf{k}} n_{-\mathbf{k}}\rangle^{-1} n_{\mathbf{k}}$. Формально ця модель є подібною до попередньої, оскільки перші дві змінні будуть ті ж самі, а густина енергії замінюється на густину тензора напружень, кореляціями якого з двома іншими змінними в нульовому наближенні теорії збурень можна знехтувати. Отже, елементи кінетичної матриці, які відповідають кореляціям з n_3 або $\ddot{n}$, будемо вважати малими. Формально подальший розгляд системи зводиться до термов'язкої заміною h на n_3.

Відмінності виникнуть у значеннях головних та перехресних елементів частотної матриці та матриці функцій пам'яті. Незбурена модель у симетризованому базисі даватиме узагальнену кінетичну матрицю (4).

Незбурені власні значення будуть $z_\pm^{(0)} = \pm i c_T k$, $z_3^{(0)} = (\frac{c_\infty^2}{c_T^2} - 1)/\tau$, тобто дві спряжені звукові та релаксаційна, що відповідає в'язкоеластичній релаксації Максвелла [13], а відповідні їм власні вектори $\mathbf{x}_3^{(0)} = (0,0,1)$, $\mathbf{x}_\pm^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mp 1, 1, 0)$. Симетризовану матрицю перехресних кореляцій задано виразом (5).

Таким чином, маємо

$$\delta\bar{T}_{3\alpha}\delta\bar{T}_{\alpha 3} = -\frac{1}{2}k^2(c_\infty^2 - c_T^2), \tag{22}$$

а поправки до власних значень при довільному τ будуть:

$$\delta z_3^{(2)} = -c_T^2 k^2 \tau \frac{(c_\infty^2/c_T^2 - 1)^2}{(c_\infty^2/c_T^2 - 1)^2 + c_T^2 k^2 \tau^2}, \tag{23}$$

$$\delta z_\pm^{(2)} = \frac{-c_T^2 k^2 \tau (c_\infty^2/c_T^2 - 1)^2 \pm i c_T \tau^2 (c_\infty^2 - c_T^2)k^3}{2[(c_\infty^2/c_T^2 - 1)^2 + c_T^2 k^2 \tau^2]}. \tag{24}$$

Кореляційний час τ для часової кореляційної функції густини враховує як теплові, так і в'язкі ефекти і вираз для нього випливає із співвідношення Ландау–Плачека для динамічного структурного фактора простої рідини [13, 14], що містить як тепловий внесок $\sim k^2$, так і в'язкоеластичний.

Тому далі доцільно розглянути окремо випадки, коли теплові ефекти ($\gamma \neq 1$) враховуються чи коли ними можна нехтувати порівняно з в'язкими ($\gamma = 1$). У першому випадку для τ маємо гідродинамічну поведінку $\tau \sim k^{-2}$, отже, й відмінна від нуля функція пам'яті $\phi_2 = (\frac{c_\infty^2}{c_T^2} - 1)\frac{1}{\tau} \sim k^2$ буде вести себе так, як і в гідродинамічній моделі. У другому випадку гідродинамічний внесок у кореляційний час містить величину $\gamma - 1 \approx 0$, яка зникає при нехтуванні тепловими флуктуаціями, а отже, слід враховувати наступний внесок, пов'язаний з поздовжньою в'язкістю D_l, а саме $\tau|_{k\to 0} \to D_l/c_T^2$.

Зупинимось спершу докладніше на випадку $\gamma \neq 1$, коли враховуються неявно теплові процеси, а кореляційний час визначений зі співвідношення Ландау–Плачека:

$$\tau = \frac{\gamma - 1}{\gamma}\left(\frac{V\lambda}{C_V}k^2\right)^{-1},$$

тобто $\tau \sim k^{-2}$. Позначивши $(c_\infty^2/c_T^2 - 1)(1/\tau) \equiv dk^2$ і враховуючи $z_3^{(0)} = -dk^2$, маємо

$$z_3 \simeq z_3^{(0)} + \delta z_3^{(2)} = -dk^2\left(1 - \frac{c_\infty^2 - c_T^2}{c_T^2}\right), \qquad (25)$$

$$z_\pm \simeq z_\pm^{(0)} + \delta z_\pm^{(2)} = -\frac{d(c_\infty^2 - c_T^2)}{2c_T^2}k^2 \pm$$

$$\pm ic_T k\left(1 + \frac{c_\infty^2 - c_T^2}{2c_T^2}\right). \qquad (26)$$

Тут, як бачимо, формальним параметром теорії збурень виступає різниця ізотермічної та нульової швидкості звуку $(c_\infty^2 - c_T^2)/c_T^2$. Знову, використовуючи вираз $1 + x/2 \approx \sqrt{1+x}$, одержуємо в (26) $1 + (c_\infty^2 - c_T^2)/2c_T^2 \approx c_\infty/c_T$, тобто має місце перенормування швидкості звуку з ізотермічної у високочастотну $c_T \to c_\infty$. Як відомо, $c_\infty > c_s > c_T$. Варто відзначити, що точний розв'язок для випадку $\tau \sim k^{-2}$ дає звукові моди саме з високочастотною швидкістю звуку $z_\pm = \pm ikc_\infty + Dk^2$. Така ситуація властива рідинам, де для звуку високої частоти (звідси й назва "високочастотна") рідина веде себе як пружне середовище подібно до твердого тіла (випадок малостисливих рідин, наприклад, рідких металів). Це пояснює ефективне збільшення швидкості звуку в рідинах як результат пружного механізму поширення звуку.

Однак фізично коректнішим для цієї моделі буде випадок, де цілком виключені теплові ефекти, тобто $\gamma = 1$, і домінуючими вважають в'язкі процеси [12]. У такому випадку кореляційний час $\tau =$const є скінченним навіть у гідродинамічній границі, і виникає незбурена релаксаційна мода зі скінченим часом життя $z_3^{(0)} = (c_\infty^2/c_T^2 - 1)(1/\tau) \equiv d_0 =$const, а поправки (23), (24) при малих k будуть залежати від співвідношення величин, що фігурують у знаменнику, а саме k та характерного значення $k_1 = (c_\infty^2/c_T^2 - 1)/c_T^3\tau = (c_\infty^2 - c_T^2)/c_T D_l$, де враховано, що $\tau|_{k\to 0} \to D_l/c_T^2$.

Якщо $k \ll k_1$, то поправки до коефіцієнтів затухання будуть близько k^2 [12]:

$$\delta z_3^{(2)} = -c_T^2\tau k^2 = -D_l k^2,$$

$$\mathrm{Re}\ (\delta z_\pm^{(2)}) = -c_T^2\tau k^2/2 = -D_l k^2/2.$$

Більш цікавими є поправки до уявних частин колективних мод, що дають зміну до закону дисперсії. Так, формально переходячи в (24) до гідродинамічної границі і зберігаючи доданки $\sim k^3$, отримуємо квадратичну поправку до швидкості звуку [12]:

$$\delta c^{(2)} = c_T(D_l/d_0)k^2 = c_T\frac{D_l^2}{2(c_\infty^2 - c_T^2)}k^2 \equiv c_T\beta k^2. \qquad (27)$$

Отже, маємо позитивну поправку до лінійної дисперсії, що викликана в'язкими процесами, яка насправді спостерігається на експерименті, про що згадується в літературі [8]. Якісно цей результат пояснює реальну поведінку дисперсійної залежності.

При $k \sim k_1$ ситуація буде іншою. Поправки до коефіцієнтів згасання згідно з (23), (24) вестимуть себе складніше, а саме як $adk^2/(d + ak^2)$, а позитивна поправка до дисперсії матиме вигляд $bk^3/(d + ak^2)$.

Для в'язкоеластичної моделі можна знайти точний розв'язок задачі на власні значення у гідродинамічній границі, шукаючи його у вигляді розкладу $z(k) = d_0 + ick + dk^2 + bk^3 + \ldots$. Оскільки у матриці $\mathbf{T}(k)$ перший степінь k входить лише з уявною одиницею, усі внески непарних степенів, зокрема першого і третього, будуть уявними. Так, обчислюючи спектр мод системи для випадку $\tau = \mathrm{const} = D_l/c_T^2$ з точністю до k^3, знаходимо

$$z_\pm = -D_l k^2/2 \pm ic_T k(1 + \beta k^2),$$

$$z_3 = -\frac{c_\infty^2 - c_T^2}{D_l} + D_l k^2, \tag{28}$$

що не суперечить розв'язку з поправками до теорії збурень (23), (24). Поправку до швидкості звуку $\sim k^2$ можна отримати, продовжуючи розклад $z(k)$ до k^3 і виділяючи уявну частину відповідного внеску. Точний результат дає

$$\beta = \frac{D_l^2}{8}\frac{5 - c_\infty^2/c_T^2}{c_\infty^2 - c_T^2} = \frac{D_l^2}{2(c_\infty^2 - c_T^2)} + \frac{D_l^2(1 - c_\infty^2/c_T^2)}{8(c_\infty^2 - c_T^2)}, \tag{29}$$

де перший доданок збігається з поправкою теорії збурень (27), що отримуємо із загального виразу (17), а другий $\sim c_\infty^2/c_T^2 - 1$ дає врахування продовження розкладу $z(k)$ до k^3 (див. вираз (21) та текст перед ним) та використання відомого розкладу $\sqrt{1+x} \simeq 1 + x/2$.

Крім позитивної дисперсії швидкості звуку, відзначимо появу в релаксаційних модах доданків $\sim D_l k^2$, як і в гідродинамічній моделі.

3.3. Термов'язкоеластична модель

Таку модель можна розглядати як узагальнення двох попередніх і будувати на базисі динамічних змінних $\{n_{\mathbf{k}}, \dot{n}_{\mathbf{k}}, \ddot{n}_{\mathbf{k}}\} + \{h_{\mathbf{k}}\}$ або $\{n_{\mathbf{k}}, \dot{n}_{\mathbf{k}}, n_{3,\mathbf{k}}\} + \{h_{\mathbf{k}}\}$, де крім в'язкопружних процесів враховано також теплові ефекти, кореляції яких можна вважати малими і розглядати як збурення. Отже, за незбурену модель вибираємо $\{n_{\mathbf{k}}, \dot{n}_{\mathbf{k}}, n_{3,\mathbf{k}}\}$, і будемо включати як збурення перехресні кореляції енергії $h_{\mathbf{k}}$ з іншими змінними.

Узагальнена гідродинамічна матриця без перехресних кореляцій для такої моделі в симетризованому базисі матиме вигляд

$$\mathbf{T}_0(k) =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & ic_T k & 0 & 0 \\ ic_T k & 0 & -ik\sqrt{c_\infty^2 - c_T^2} & 0 \\ 0 & ik\sqrt{c_\infty^2 - c_T^2} & (\frac{c_\infty^2}{c_T^2} - 1)\frac{1}{\tau} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{V}{C_V}\lambda k^2 \end{pmatrix}, \tag{30}$$

а термов'язкі перехресні кореляції розглянуто як збурення

$$\delta\mathbf{T}(k) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\omega_{\dot{n}h} \\ 0 & 0 & 0 & \phi_{3h} \\ 0 & -i\omega_{h\dot{n}} & \phi_{h3} & 0 \end{pmatrix}, \tag{31}$$

де кореляційний час τ, на відміну від попереднього випадку, залишається скінченним у границі $k \to 0$ навіть при $\gamma \neq 1$ і прямує в гідродинамічній границі до D_l/c_T^2, а ϕ_{h3}, ϕ_{3h} – це функції пам'яті, побудовані на змінних h та n_3.

За стартові умови приймемо, що $c_\infty^2 - c_T^2$ не мале і в гідродинамічній границі $k \ll k_1$. Використовуючи точний розв'язок для в'язкоеластичної моделі (28) у гідродинамічній границі, маємо для незбуреної моделі (30) такі власні значення:

$$z_\pm^{(0)} = -D_l k^2/2 \pm ic_T k(1 + \beta k^2),$$

$$z_3^{(0)} = -\frac{c_\infty^2 - c_T^2}{D_l} + D_l k^2,$$

$$z_4^{(0)} = -\frac{V}{C_V}\lambda k^2, \tag{32}$$

де β визначається з (29).

Для "незбурених" власних векторів, нормованих на одиницю, маємо $\mathbf{x}_\pm^{(0)} = (1/\sqrt{2})\{\pm 1, 1, 0, 0\}$, $\mathbf{x}_3^{(0)} = \{0, 0, 1, 0\}$, $\mathbf{x}_4^{(0)} = \{0, 0, 0, 1\}$.

Матриця перехресних кореляцій у симетризованому базисі матиме відмінні від нуля елементи на відповідних перехресно-кореляційних позиціях.

Малим параметром теорії збурень є знову ж таки α_P/κ_T або ж характерна величина $(\alpha_P^2 TV)/(\kappa_T C_V) = \gamma - 1$. Обчислимо поправки до власних мод системи, викликані включенням перехресних кореляцій (31) за допомогою отриманих вище виразів теорії збурень (10). Маємо

$$\delta\bar{T}_{4\pm}\delta\bar{T}_{\pm 4} = -\frac{\alpha_P^2 TV}{2\kappa_T C_V}c_T^2 k^2, \quad \delta\bar{T}_{43}\delta\bar{T}_{34} = \phi_{h3}\phi_{3h} \sim k^4,$$

оскільки симетризовані ϕ_{h3}, ϕ_{3h} пропорційні k^2. Далі, використовуючи вираз (10) та точні моди (32), можемо отримати поправки до звукових та теплової мод:

$$z_\pm = -D_l k^2/2 - \frac{\alpha_P^2 TV((V/C_V)\lambda + D_l/2)}{2\kappa_T C_V}k^2 \pm$$

$$\pm i c_T (1+\beta k^2)\left(1+\frac{\alpha_P^2 TV}{2\kappa_T C_V}\right) k, \qquad (33)$$

$$z_4 = -\frac{V}{C_V}\lambda k^2\left(1-\frac{\alpha_P^2 TV}{\kappa_T C_V}\right) - \frac{\alpha_P^2 TV}{\kappa_T C_V} D_l k^2, \qquad (34)$$

тобто знову спостерігаємо перенормування ізотермічної швидкості в адіабатичну $c_s = c_T\sqrt{\gamma}$, якщо використати $1+x/2 \approx \sqrt{1+x}$, перенормування коефіцієнтів затухання і заміною виразу $c_T^2\tau k^2/2$ на $c_s^2\tau k^2/2$, та перенормування теплоємності в $C_P = \gamma C_V$, якщо враховати $(1+x)^{-1} \approx 1-x$ при малих x. У цьому випадку можемо стверджувати, що кореляційний час перенормовується в $\tau_{k\to 0} \to D_l/c_s^2$. Що стосується поправки до z_3, то в гідродинамічній границі вона буде пропорційна k^4. Зауважимо, що $z_3^{(0)} = \text{const} \neq 0$ в границі $k \to 0$, що типово для збуджень кінетичного типу. До теплової моди $z_4^{(0)}$ отримуємо поправку, пропорційну до k^2, що означає перенормування теплопровідності, яке спричинене взаємними кореляціями теплових та в'язкоеластичних процесів.

Отже, остаточно маємо

$$z_\pm = -D_l k^2/2 - (\gamma-1)\frac{V}{C_V}\lambda k^2 \pm i(c_s + \delta c_s^{(2)})k$$

$$z_3 = -\frac{c_\infty^2 - c_s^2}{D_l} + D_l^2 k^2$$

$$z_4 = -\frac{V}{C_P}\lambda k^2 - (\gamma-1)D_l k^2. \qquad (35)$$

Як бачимо, виникає квадратична позитивна дисперсія адіабатичної швидкості звуку, що викликана в'язкоеластичною поправкою (29), і враховуючи перенормування швидкості звуку в адіабатичну, маємо квадратичну поправку у формі

$$\delta c_s = c_s \frac{D_l^2}{8}\frac{5 - c_\infty^2/c_T^2}{c_\infty^2 - c_T^2}k^2, \qquad (36)$$

що дає позитивну дисперсію адіабатичної швидкості звуку.

Очевидно, для більш точного розв'язку варто розглядати термов'язкоеластичну модель з включенням ще й термоеластичних кореляцій $\ddot{n} - h$, а також кореляцій з потоком ентальпії $\dot{h}$, тобто стартувати вже з п'ятизмінної моделі [15]. Це розширить і ускладнить опис, оскільки при цьому включаться ефекти термодифузії та теплової пружності.

4. Висновки

Таким чином, для обчислення поправок до узагальнених колективних мод, що спричиняються перехресними кореляціями між динамічними процесами різної природи, можна використовувати теорію збурень. Нами запропоновано загальний формалізм такого підходу у динамічній теорії рідин. Отримано загальні вирази до другого порядку теорії збурень включно.

Показано, що, незважаючи на формальну схожість побудованого формалізму до стаціонарної теорії збурень у квантовій механіці, така теорія збурень має деякі принципові відмінності. Так, по-перше, на відміну від квантово-механічної теорії, де ортогональність власних векторів забезпечується ермітовістю гамільтоніана, власні вектори незбуреної кінетичної матриці в загальному випадку не є ортогональними. Подруге, специфіка структури узагальненої гідродинамічної матриці приводить до певних особливостей у розрахунку незбурених власних векторів, внаслідок чого перша поправка теорії збурень до колективних мод системи буде нульовою, а перші нетривіальні поправки будуть виникати лише у другому порядку.

Проведено апробацію такої теорії збурень для найпростіших динамічних моделей простої рідини. Показано, що отримані у такий спосіб результати правильно описують ефекти перенормування швидкості звуку та коефіцієнтів згасання в гідродинамічній границі, а наближені аналітичні вирази зведено до відомих результатів при підсумовуванні відповідних рядів теорії збурень.

Отримані результати дають підстави вважати, що є добрі перспективи у напрямку використання теорії збурення у запропонованій нами схемі при вивченні більш складних моделей, зокрема, у випадку багатокомпонентних рідин.

1. T. Bryk and I. Mryglod, J. Phys. Cond Matt. **16**, L463 (2004).
2. I. Mryglod, T. Bryk, and V. Kuporov, in *Ionic Soft Matter: Modern Trends in Theory and Applications*, edited by D. Henderson, M. Holovko, and A. Trokhymchuk, NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry, Vol. 206 (Springer, Dordrecht, 2005), p. 109.
3. I. Mryglod and V. Kuporov, Ukr. Fiz. Zh. **53**, 908 (2008).
4. G.H. Wegdam, A. Bot, R.P. Schram, and H.M. Schaink, Phys. Rev. Lett. **63**, 2697 (1989).
5. J. Bosse, Phys. Rev. Lett. **57**, 3277 (1986).

6. S.C. Santucci, D. Fioretto, L. Comez, A. Gessini, and C. Masciovecchio, Phys. Rev. Lett. **97**, 225701 (2006).
7. C.-H. Chung, J. Kor. Nucl. Soc. **6**, 171 (1974).
8. C. Morkel and T. Bodensteiner, J. Phys. Cond. Matt. **2**, SA251 (1990).
9. T. Bryk and I. Mryglod, Cond. Matt. Phys. **10**, 481 (2007).
10. Ф.М. Куни, *Статистическая физика и термодинамика* (Наука, Москва, 1981).
11. Ф.Р. Гантмахер, *Теория матриц* (Наука, Москва, 1967).
12. T. Bryk and I. Mryglod, Cond. Matt. Phys. **11**, 139 (2008).
13. J.P. Hansen and I.R. McDonald, *Theory of Simple Liquids* (Academic Press, London, 1986).
14. I. Mryglod, R. Folk, S. Dubyk, and Yu. Rudavskii, Physica A **277**, 389 (2000).
15. T. Bryk and I. Mryglod, Cond. Matt. Phys. **7**, 471 (2004).

Одержано 15.03.10

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ КОЛЛЕКТИВНЫХ МОД В ДИНАМИКЕ ПРОСТЫХ И СЛОЖНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

И.М. Мриглод, В.М. Купоров

Р е з ю м е

Формализм теории возмущений используется для вычисления поправок к обобщенным коллективным модам, вызванных слабыми перекрестными корреляциями между тепловыми и вязкоупругими динамическими процессами в простых и сложных жидкостях. Построена общая формулировка такой теории возмущений до второго порядка включительно. Проведена её апробация на известных простейших динамических моделях жидкостей и выполнен анализ результатов по сравнению с точными результатами для этих моделей. Показано, что результаты теории возмущений разрешают при соответственных условиях отобразить известные результаты для этих моделей.

PERTURBATION THEORY FOR COLLECTIVE MODES IN THE DYNAMICS OF SIMPLE AND COMPLEX LIQUIDS

I.M. Mryglod, V.M. Kuporov

Institute for Condensed Matter Physics,
Nat. Acad. of Sci. of Ukraine
(*1, Swentsytskyi Str., Lviv 79011, Ukraine;*
e-mail: slw@ph.icmp.lviv.ua)

S u m m a r y

The perturbation theory formalism is used to calculate the corrections to the generalized collective modes caused by weak cross correlations between thermal and viscoelastic dynamic processes in simple and complex liquids. The general formulation of this perturbation theory up to the second order of magnitude inclusive is performed. The theory is tested by the example of the simplest dynamic models of liquids, and the obtained results are analyzed as compared with the accurate solutions for these models. It is shown that, under appropriate conditions, the results of perturbation theory allow one to reproduce the known solutions for these models.