

# ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ОБЛАСТИ ЧАСТОТНОЙ ДИСПЕРСИИ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЕРЕНОСА КЛАССИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРИРОДЫ ЗАТУХАНИЯ РЕЛАКСИРУЮЩИХ ПОТОКОВ

С. ОДИНАЕВ

Таджикский технический университет им. М.С. Осими

(Ул. акад. Раҳжабовых, 10, Душанбе; e-mail: odsb@tarena-tj.org)

УДК 538.93  
© 2011

Рассмотрена область частотной дисперсии динамического коэффициента сдвиговой вязкости  $\eta_s(\omega)$  простых жидкостей, полученного методом кинетических уравнений, когда восстановление равновесной структуры жидкости происходит по закону диффузии или экспоненциально. При определенном выборе потенциала межмолекулярного взаимодействия  $\Phi(|\mathbf{r}|)$  и равновесной радиальной функции распределения  $g_0(|\mathbf{r}|)$  проведены численные расчеты  $\eta_s(\omega)$  для жидкого аргона в зависимости от плотности  $\rho$ , температуры  $T$  и частот  $\omega$ . Полученные теоретически вычисленные результаты сдвиговой вязкости  $\eta_s(\omega)$  находятся в удовлетворительном количественном согласии с экспериментальными данными. Показано, что область частотной дисперсии  $\eta_s(\omega)$  на основе диффузионного механизма, т.е. структурной релаксации, является широкой  $\sim 10^5$  Гц, а в случае экспоненциального затухания вязкого тензора напряжения является узкой  $\sim 10^2$  Гц, что соответствует как акустическим измерениям, так и результатам феноменологической теории.

## 1. Введение

Исследования динамических коэффициентов переноса и соответствующих им динамических модулей упругости в широком диапазоне частот дают важную информацию о кинетике необратимых процессов в жидкостях, молекулярной природе их строения, об установлении и связи с межмолекулярными явлениями, а также о механизме восстановления равновесной структуры в них.

При вязком течении происходят передачи массы, импульса и энергии от одной области жидкости к другой, приводящие к переносу в жидкостях, которые характеризуются коэффициентами диффузии, вязкости и теплопроводности. Скорости процессов переноса в жидкостях велики, и в состояниях, близких к равновесию, они пропорциональны градиентам массы, импульса и температуры. Следует отметить, что

при высоких скоростях деформации в жидкостях [1], наряду с вязким течением, в них появляются упругие свойства, и каждому виду переноса соответствуют определенные упругие свойства. В этом случае вязкоупругие свойства жидкостей можно изучить на основе механической модели Кельвина или Максвелла, а уравнением реологии будет уравнение Кельвина (Максвелла) или Фогта, результирующее напряжение которого состоит из упругого напряжения, пропорционального деформации жидкости, и вязкого напряжения, пропорционального скорости деформации [2]. В этом случае в акустических уравнениях содержится комплексный эффективный модуль упругости (например, формула (6.30) работы [2]), где реальная часть является динамическим модулем упругости, а мнимая – динамической вязкостью, т.е. являются функциями частот.

Согласно [2, 3] сдвиговая и объемная вязкость могут иметь по одному или несколько характерных времен релаксации. Следовательно, число максвелловских механизмов вязкоупругости будет одно или более (например, формулы (6.30), (6.42) работы [2] и (5.17) работы [3]). Там же, на основе этих формул, а также рис. 29 и 33, приведены частотные зависимости динамического модуля упругости  $E(\omega)$  и динамической вязкости  $\eta(\omega)$  при наличии одного и двух релаксационных процессов с разными значениями времен релаксации ( $\tau_2 = (1/50)\tau_1$ ). Кривые частотных зависимостей  $E(\omega)$  и  $\eta(\omega)$  изображены в логарифмической шкале частот, они занимают интервал более трех декад, и в натуральном масштабе ее низкочастотная часть оказалась бы совершенно неразличимой. Если времена релаксации близки, кривые могут оказаться вообще монотонными и по их форме нельзя будет судить о том, что имеется ли в действительности одно или два времени релаксации (например, рис. 34 работы [2] при  $\tau_2 = (1/3)\tau_1$ ), т.е. отсут-

стует точка перегиба. Согласно [2, 3] по мере возрастания ширины области частотной дисперсии и в отсутствие достаточно четко выраженных ступенек на кривой никакие выводы об отдельных релаксационных механизмах невозможны. Единственно обоснованным методом расшифровки таких кривых авторы считают введение сплошного спектра времен релаксации, который характерен для процесса структурной релаксации в жидкостях. В этом случае в определении комплексного модуля упругости следует заменить суммы интегралами (формула (6.43) работы [2] и формулы (5.47)–(5.54) работы [3]). Однако в подинтегральных выражениях функций  $H(\tau)$ ,  $k(\tau/\tau')$  и  $g(\tau/\tau')$  плотности спектра времен релаксации остаются неизвестными. Согласно [3] выбор этих функций распределения является в какой-то мере произвольным, так как эксперименту часто удовлетворяют одинаково хорошо несколько функций. Следует отметить, что все аналитические выражения для модуля упругости  $E(\omega)$ , коэффициента вязкости  $\eta(\omega)$ , скорости  $C(\omega)$  и поглощения  $\alpha(\omega)$  звуковых волн в жидкостях, анализ которых проведен выше, получены в работах [2, 3] в рамках феноменологической теории.

Исследование динамических коэффициентов переноса и динамических модулей упругости жидкостей можно проводить как на основе феноменологической, так и молекулярно-кинетической теории. Феноменологическая теория описывает наблюдаемые явления на основе соотношений между макроскопически измеряемыми величинами и основана на методах термодинамики необратимых процессов. Однако она не позволяет детально изучить механизм процессов переноса. Молекулярная теория позволяет изучить механизм явлений переноса жидкостей и вывести законы, управляющие этими процессами, на основе свойств и изменения структуры, а также природы протекания внутренних релаксационных процессов в них. Молекулярно-кинетическая теория дает возможность получить уравнения обобщенной гидродинамики, которые по виду совпадают с макроскопическими уравнениями гидродинамики, полученной на основе феноменологической теории, однако с той лишь разницей, что коэффициенты переноса являются функциями пространственных и временных масштабов гидродинамических величин [4]. Их фурье-образ дает частотно-зависимые аналитические выражения коэффициентов переноса и модулей упругости, т.е. коэффициентов восприимчивости жидкостей. Следовательно, молекулярная теория явления переноса в жидкостях дополняет результаты феноменологиче-

ской теории, а также дает возможность определить механизм и природу протекания этих процессов.

При анализе экспериментальных результатов исследований структурной релаксации в жидкостях [2] область частотной дисперсии коэффициентов вязкости и поглощения составляет от двух до пяти декад, которые на основе феноменологической теории определить невозможно. В связи с этим попытаемся на основе единой микроскопической теории исследовать область частотной дисперсии динамических коэффициентов вязкости простых жидкостей, которые имеют вклады трансляционной и структурной релаксаций в зависимости от природы закона затухания потока импульса в импульсном и конфигурационном пространствах.

Следует отметить, что наиболее хорошо экспериментально исследуемыми как статическими, так и динамическими коэффициентами переноса в жидкостях являются коэффициенты сдвиговой вязкости, теплопроводности и электропроводности, а также акустические параметры скорости и поглощения звуковых волн в широком интервале изменения термодинамических параметров состояния и частот. Для определения области частотной дисперсии ограничимся рассмотрением динамического коэффициента сдвиговой вязкости  $\eta_s(\omega)$  простых жидкостей, когда восстановление равновесной структуры жидкости происходит по законам диффузии или экспоненциально. При определенном выборе  $\Phi(|\mathbf{r}|)$  и  $g(|\mathbf{r}|)$  проведем численный расчет  $\eta_s(\omega)$  для простых жидкостей на основе полученных аналитических выражений. При удовлетворительном количественном согласии полученных численных результатов  $\eta_s(\omega)$  с существующими литературными экспериментальными данными, на основе данной модели будем теоретически исследовать вязкоупругие и акустические свойства, т.е. объемную вязкость  $\eta_v(\omega)$ , модули сдвиговой  $\mu(\omega)$  и объемной  $K(\omega)$  упругости, скорость  $C(\omega)$  и коэффициент поглощения  $\alpha(\omega)$  классических жидкостей.

## 2. Исходные уравнения и определение динамической сдвиговой вязкости

Для определения аналитического выражения  $\eta_s(\omega)$  в качестве исходного воспользуемся микроскопическим определением тензора напряжения  $\sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t)$  простых жидкостей [5]:

$$\sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t) = K^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t) +$$

$$+ \frac{\sigma^3}{2} \int \frac{\partial \Phi_{12}(|\mathbf{r}|)}{\partial r} \frac{r^\alpha r^\beta}{r} n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t) d\mathbf{r}, \quad (1)$$

где  $K^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t) = nkT\delta^{\alpha\beta} + k^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t)$  – кинетическая часть тензора потока импульса, являющаяся импульсным моментом одночастичной функции распределения  $f_1(\mathbf{x}_1, t)$ , а  $nkT$  и  $k^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t)$  – кинетические части неравновесного давления и тензора вязкого напряжения, соответственно,  $\mathbf{r} = (q_2 - q_1)/\sigma$  – приведенное взаимное расстояние между молекулами,  $\sigma$  – диаметр молекулы,  $n(\mathbf{q}_1, t)$  и  $T(\mathbf{q}_1, t)$  – локальная плотность и температура,  $\Phi_{12}(|\mathbf{r}|)$  – межмолекулярный потенциал взаимодействия,  $n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t)$  – неравновесная бинарная плотность частиц в конфигурационном пространстве, которая является импульсным моментом двухчастичной функции распределения  $f_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ ,  $\mathbf{x} = \{\mathbf{q}, \mathbf{p}\}$ ,  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{p}$  – координаты и импульсы частиц. Кинетические уравнения для одно- и двухчастичной функций распределения с учетом вкладов крупномасштабных флуктуаций получены в [5]. Правые части уравнения для  $f_1(\mathbf{x}_1, t)$  и  $f_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$  являются операторами столкновения Фоккера–Планка и обеспечивают необратимость этих уравнений во времени, т.е. дают возможность описания диссипативных процессов в жидкостях. В левых частях этих уравнений имеются интегральные члены (динамические члены Боголюбова), которые дают вклады крупномасштабных флуктуаций на релаксационные параметры и являются следствием коллективных взаимодействий в жидкостях.

Из выражения (1) следует, что релаксация  $\sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t)$  складывается из трансляционной и структурной компонент. Трансляционная релаксация описывается уравнением для кинетической части вязкого тензора напряжения  $k^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t)$  и характеризуется одним временем релаксации, а структурная релаксация описывается уравнением для бинарной плотности частиц в конфигурационном пространстве  $n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t)$  и характеризуется непрерывным спектром времен релаксаций.

Уравнения для кинетической части вязкого тензора напряжения  $k^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t)$  и бинарной плотности  $n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t)$  получены в [5] на основе кинетических уравнений для  $f_1(\mathbf{x}_1, t)$  и  $f_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ , которые в линейном приближении в случае независимых потоков имеют следующий вид:

$$\frac{\partial k^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t)}{\partial t} + 2n_0 k T_0 \left\{ \frac{\partial \vartheta^\alpha(q_1, t)}{\partial q_1^\beta} \right\} = -\frac{1}{\tau} k^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t), \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \omega_0 \hat{L} n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t) = F(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t), \quad (3)$$

где  $n_0, T_0$  – равновесная плотность числа частиц и температура,  $\vartheta^\alpha(\mathbf{q}_1, t)$  – средняя скорость частиц,  $\tau = m/(2\beta)$  – характерное время трансляционной релаксации (т.е. время рассасывания  $k^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t)$  в импульсном пространстве),  $\tau_0 = \omega_0^{-1} = \beta\sigma^2/2kT$  – феноменологический параметр, являющийся аналогом времени диффундирующей молекулы,  $k$  – постоянная Больцмана,  $\beta$  – коэффициент трения,  $\hat{L} = -\frac{\partial}{\partial r^\alpha} \left[ \frac{\partial}{\partial r^\alpha} - \frac{\partial}{\partial r^\alpha} \ln g_0(|\mathbf{r}|) \right]$  – оператор Смолуховского в конфигурационном пространстве:

$$F(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t) = -2n_2^0(|\mathbf{r}|) \left\{ \left[ 1 + \frac{1}{6} \frac{\partial \ln g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial \ln r} - \frac{1}{2} \left[ n \left( \frac{\partial \ln g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial n} \right)_T + \gamma T \left( \frac{\partial \ln g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial T} \right)_n \right] \operatorname{div} \vartheta + \left( \frac{r^\alpha r^\beta - (1/3)r^2 \delta^{\alpha\beta}}{r^2} \right) \frac{\partial \ln g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial \ln r} \left\{ \frac{\partial \vartheta^\alpha}{\partial q_1^\beta} \right\} \right\}, \quad (4)$$

$\gamma = (nc_V)^{-1} (\partial P / \partial T)_n$ ;  $n_2^0(|\mathbf{r}|) = n_0^2 g_0(|\mathbf{r}|)$  – равновесная бинарная плотность,  $c_V$  – изохорная теплоемкость жидкости,  $g_0(|\mathbf{r}|)$  – равновесная радиальная функция распределения.

Уравнение (2) для  $k^{\alpha\beta}(\mathbf{q}_1, t)$  является неоднородным линейным дифференциальным уравнением с разделяющимися переменными, решения которого экспоненциально затухают с характерным временем  $\tau$ . Уравнение (3) является неоднородным уравнением параболического типа, т.е. уравнением Смолуховского для бинарной плотности  $n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t)$  в конфигурационном пространстве. Решение уравнения (3) представляет собой задачу Коши ( $t > 0, -\infty \leq r \leq \infty$ ) с нулевым начальным условием, которое имеет вид [5]:

$$n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{-\infty} G(r, r_1, t - t_1) F(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}_1, t_1) d\mathbf{r}_1, \quad (5)$$

где

$$G(r, r_1, t - t_1) = \frac{2(rr_1)^{-1}}{(2\pi)^3} \left[ \frac{\pi}{\omega_0(t - t_1)} \right]^{1/2} \times$$

$$\times \left\{ \exp \left[ -\frac{(r-r_1)^2}{4\omega_0(t-t_1)} \right] - \exp \left[ -\frac{(r+r_1)^2}{4\omega_0(t-t_1)} \right] \right\}. \quad (6)$$

Выражение (6) представляет собой фундаментальное решение (функция Грина) уравнения Смолуховского (3) для  $n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t)$  и описывает пространственно-временное поведение бинарной плотности, следовательно, структурной релаксации. Как видно из уравнений (3)–(6), процесс перестройки структуры в классических жидкостях носит диффузионный характер и описывается непрерывным спектром времен релаксации. В этом случае рассасывание необратимых потоков является диффузионным и происходит по степенному закону  $t^{-d/2}$ , который совпадает с дальневременным поведением автокорреляционных функций [6–8].

Совершая фурье-преобразование по времени в (1) и в последующих уравнениях, на основе уравнений (1), (2), (5) и (6) для динамического коэффициента сдвиговой вязкости  $\eta_s(\omega)$  имеем [5, 9]:

$$\eta_s(\omega) = \frac{nkT\tau}{1+(\omega\tau)^2} + \frac{2\pi n^2\sigma^3}{15} \int_0^\infty dr r^3 \frac{\partial\Phi(|\mathbf{r}|)}{\partial r} \times \int_0^r G_1(r, r_1, \omega) \frac{\partial g_0(r_1)}{\partial r_1} r_1 dr_1, \quad (7)$$

где

$$G_1(r, r_1, \omega) = \frac{\tau_0}{\alpha} \left[ (\sin \varphi_1 - \cos \varphi_1) e^{-\varphi_1} - (\sin \varphi_2 - \cos \varphi_2) e^{-\varphi_2} \right], \quad \varphi_{1,2} = \frac{\alpha}{2} (r \mp r_1), \quad \alpha = (2\omega\tau_0)^{1/2}. \quad (8)$$

Первый член  $\eta_s(\omega)$  в (7) учитывает вклады трансляционной релаксации, т.е. релаксацию вязкого тензора напряжения в импульсном пространстве, характерное время которого равно  $\tau = m/(2\beta)$ . Однако частотная зависимость  $\eta_s(\omega)$  в основном описывается частотным поведением функции  $G_1(r, r_1, \omega)$  в широком диапазоне частот, а также асимптотическим поведением  $\eta_s(\omega)$  при низких  $\sim \omega^{1/2}$ , совпадающим с результатами, полученными методом молекулярной

динамики [10–12] и при высоких частотах  $\sim \omega^{-1}$ , когда феноменологическая релаксационная теория дает асимптотику  $\sim \omega^{-2}$ . Функция  $G_1(r, r_1, \omega)$  является аналогом плотности спектра времен релаксации  $H(\tau)$ ,  $k(\tau/\tau')$  и  $g(\tau/\tau')$  в работах [2, 3], явный вид которой мы находили, см. формулу (8). Согласно (8) в основе частотного поведения  $G_1(r, r_1, \omega)$  лежит непрерывный спектр времен структурной релаксации, и только в приближении экспоненциального закона затухания релаксирующих потоков можно получить аналог характерного времени  $\tau_q$  работы [13].

### 3. Определение $\eta_s(\omega)$ при наличии экспоненциального закона затухания потоков

Теперь рассмотрим случай, когда восстановление равновесной структуры происходит по экспоненциальному закону. Для этого в уравнении (3) производим замену релаксационного члена Смолуховского на релаксационный член, приводящую к экспоненциальному закону затухания в виде

$$\omega_0 \hat{L} n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}_1, t) = -\omega_0 \left[ n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}_1, t) - n_2^{(0)}(|\mathbf{r}|, r, T) \right], \quad (9)$$

где  $n_2^{(0)}(|\mathbf{r}|, n(\mathbf{q}, t), T(\mathbf{q}, t)) = n_2^{(0)}(|\mathbf{r}|) + \tilde{n}_2(|\mathbf{r}|, n, T)$  – локально равновесная бинарная плотность,  $n_2^{(0)}(|\mathbf{r}|) = n_0^2 g_0(|\mathbf{r}|)$  – равновесная бинарная плотность, а

$$\tilde{n}_2(|\mathbf{r}|, n(\mathbf{q}_1, t), T(\mathbf{q}_1, t)) = \left( \frac{\partial n_2^0(|\mathbf{r}|)}{\partial n} \right)_T n(\mathbf{q}_1, t) + \left( \frac{\partial n_2^0(|\mathbf{r}|)}{\partial T} \right)_n T(\mathbf{q}_1, t). \quad (10)$$

Учитывая (9) и (10) в уравнении (3) и используя уравнение гидродинамики в локальном приближении, для фурье-образа по времени функции  $n_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{r}, t)$ , получаем следующее решение:

$$n_2(\mathbf{q}, \mathbf{r}, \omega) = n_0^2 g_0(|\mathbf{r}|) - n_0^2 \left[ n \left( \frac{\partial g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial n} \right)_T + \gamma T \left( \frac{\partial g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial T} \right)_n \right] \nabla \mathbf{u}(\omega) + \frac{i\omega\tau_0}{1-i\omega\tau_0} \left[ \varphi_0(r) \nabla \mathbf{u}(\omega) + \varphi^{\alpha\beta}(r) \left\{ \frac{\partial u^\alpha(\omega)}{\partial q_1^\beta} \right\} \right], \quad (11)$$

где  $\mathbf{u}(\omega)$  – фурье-образ вектора смещения,

$$\varphi^{\alpha\beta}(r) = \frac{r^\alpha r^\beta - (1/3)r^2 \delta^{\alpha\beta}}{r} \frac{g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial r},$$

$$\varphi_0(r) = \frac{r}{3} \frac{\partial g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial r} - \left[ n \left( \frac{\partial g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial n} \right)_T + \right.$$

$$\left. + \gamma T \left( \frac{\partial g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial T} \right)_n \right], \nabla \mathbf{u}(\omega) = \text{div} \mathbf{u}(\omega),$$

$$\left\{ \frac{\partial u^\alpha(\omega)}{\partial q^\beta} \right\} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u^\alpha}{\partial q^\beta} + \frac{\partial u^\beta}{\partial q^\alpha} + \frac{2}{3} \delta^{\alpha\beta} \text{div} \mathbf{u}(\omega) \right).$$

Совершая фурье-преобразование по времени в (1) с учетом (11) для динамического коэффициента сдвиговой вязкости  $\eta_s(\omega)$  имеем

$$\eta_s(\omega) = \frac{nkT\tau}{1 + (\omega\tau)^2} + \frac{2\pi n^2 kT \sigma^3 \tau_0}{15} \frac{1}{1 + (\omega\tau_0)^2} \times \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\mathbf{r}|)}{\partial r} \frac{\partial g_0(|\mathbf{r}|)}{\partial r} r^4 dr, \quad (12)$$

где  $\Phi^*(|\mathbf{r}|) = \Phi(|\mathbf{r}|)/kT$  – приведенный потенциал межмолекулярного взаимодействия.

Выражение (12) также является динамическим коэффициентом сдвиговой вязкости, когда восстановление равновесной структуры жидкости происходит по экспоненциальному закону. Следует отметить, что выражение (12) является аналогом формул (6.30), (6.42) работы [2] и (5.17) работы [3], полученных на основе феноменологической теории, однако здесь второй член определяется посредством  $\Phi(|\mathbf{r}|)$  и  $g_0(|\mathbf{r}|)$ , т. е. равновесные молекулярные параметры, которые при определенном выборе модели жидкости в литературе считаем известными [15–17].

#### 4. Выбор модели и проведение численных расчетов

Ранее в работе [9] нами были проведены численные расчеты  $\eta_s(\omega)$ , согласно формулы (7) для жидкого Ag в широком диапазоне частот. Однако во всех расчетах коэффициент трения жидкости  $\beta$  брался постоянным  $\beta \approx 2,85 \cdot 10^{-13}$  кг/с, т. е. не учитывалась зависимость  $\beta$  от термодинамических параме-

тров состояния, а в радиальной функции распределения  $g_0(|\mathbf{r}|)$  плотностной зависимостью пренебрегали. Там же ограничивались качественным сравнением полученных численных теоретических результатов с экспериментальными данными.

При проведении численных расчетов  $\eta_s(\omega)$  по (7) и (12) возникают трудности относительно определения коэффициента трения жидкости  $\beta$ , которое невозможно в рамках рассмотренной теории. Правые части кинетических уравнений, которые описывают необратимость этих уравнений во времени (например, в нашем случае оператор столкновения Фоккера–Планка), описывают диссипативные процессы в жидкостях и содержат коэффициент трения. Чтобы улучшить согласие теоретически вычисленных значений с экспериментальными результатами коэффициентов  $\eta_s(\omega)$ ,  $\beta$ , времена релаксации тензора напряжения в импульсном  $\tau$  и конфигурационном  $\tau_0$  пространстве, следует оптимально выбрать межмолекулярный потенциал взаимодействий  $\Phi(|\mathbf{r}|)$ , радиальную функцию распределения  $g_0(|\mathbf{r}|)$ , а также зависимость последних от плотности  $\rho$  и температуры  $T$ .

В качестве исходного воспользуемся моделью  $\Phi(|\mathbf{r}|)$ ,  $g_0(|\mathbf{r}|)$  и  $\beta$ , рассмотренной в [18, 19], в следующем виде:

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

$$g(|\mathbf{r}|) = y(\rho^*) \exp\left(-\frac{\Phi(|\mathbf{r}|)}{kT}\right),$$

$$\beta^2 = \frac{4\pi}{3} \rho \sigma^3 \int_0^\infty \nabla^2 \Phi(|\mathbf{r}|) g_0(|\mathbf{r}|) r^2 dr, \quad (13)$$

где  $\varepsilon$  – глубина потенциальной ямы,  $y(\rho^*) = (2 - \rho^*)/2(1 - \rho^*)^3$  – контактная функция Карнахана–Старлинга [17],  $\rho^* = \frac{\pi N_0 \sigma^3}{6 M} \rho$  – приведенная плотность,  $N_0$  – число Авогадро,  $M$  – молярная масса,  $\rho = mn$  – плотность жидкости,  $m, \sigma, n = N/V$  – масса, диаметр и числовая плотность частиц жидкости,  $\nabla^2 = (1/r^2)(\partial/\partial r)(r^2 \partial/\partial r)$  – радиальная часть оператора Лапласа.

На основе выражения (7) и (12) с учетом (13) проведены численные расчеты динамического коэффициента сдвиговой вязкости  $\eta_s(\omega)$  для жидкого Ag в зависимости от термодинамических параметров состояния ( $\rho, T$ ) в широком диапазоне частот. Соответству-

**Т а б л и ц а 1**

$T = 86 \text{ K}$				$T = 90 \text{ K}$				$T = 100 \text{ K}$			
$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$\eta_S$ , мПа·с			$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$\eta_S$ , мПа·с			$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$\eta_S$ , мПа·с		
	[13]	форм. (7)	форм. (12)		[13]	форм. (7)	форм. (12)		[13]	форм. (7)	форм. (12)
1402	0,272	0,271	0,234	1377	0,235	0,236	0,203	1312	0,180	0,174	0,147
1407	0,276	0,276	0,237	1383	0,239	0,242	0,206	1319	0,183	0,178	0,149
1413	0,280	0,283	0,240	1390	0,242	0,248	0,209	1327	0,186	0,183	0,152
1419	0,283	0,289	0,243	1396	0,245	0,254	0,212	1334	0,189	0,188	0,155
				1405	0,250	0,263	0,217	1347	0,194	0,198	0,160
				1418	0,255	0,276	0,224	1362	0,199	0,209	0,166

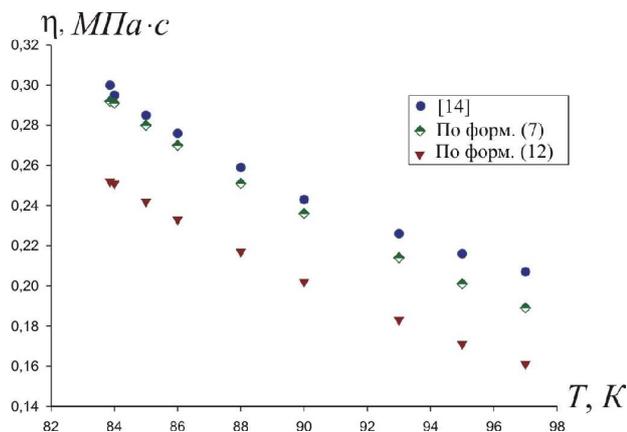


Рис. 1. Температурная зависимость сдвиговой вязкости  $\eta_s(\nu)$  при  $\dot{\nu} = 10^{-6}$  ( $\nu \sim 10^7$ ) Гц и сравнение с экспериментальными результатами [14]

ющие значения  $\rho$  и  $T$  взяты из экспериментальных работ [13, 14].

Результаты проведенных теоретических численных расчетов изочастотного  $\eta_s(\omega)$  при  $\dot{\nu} = 10^{-6}$  ( $\nu \approx 10^7$ ) Гц на основе формул (7) и (12) в интервале температур  $84 \leq T \leq 100 \text{ K}$  при разных значениях плотности  $\rho$  для жидкого Ag и сравнение с экспериментальными данными [13, 14] приведены в табл. 1 и 2.

Видно, что теоретические значения  $\eta_s(\omega)$  как по температурой, так и по плотностной зависимости находятся в хорошем количественном согласии с экспериментальными результатами. Вычисленные значения  $\eta_s(\omega)$  по формуле (12) немного занижены.

Сравнение температурной зависимости изочастотной ( $\dot{\nu} = 10^{-6}$ ,  $\nu \sim 10^7$  Гц) сдвиговой вязкости  $\eta_s(\omega)$  с экспериментальными результатами [14] приведены на рис. 1, а на рис. 2 – частотная зависимость  $\eta_s(\omega)$  при  $T_1 = 84 \text{ K}$  и  $T_2 = 90 \text{ K}$ , в широком диапазоне частот  $10^{-4} \leq \dot{\nu} \leq 10$  ( $10^8 \leq \nu \leq 10^{13}$ ) Гц, полученные согласно формул (7) и (12).

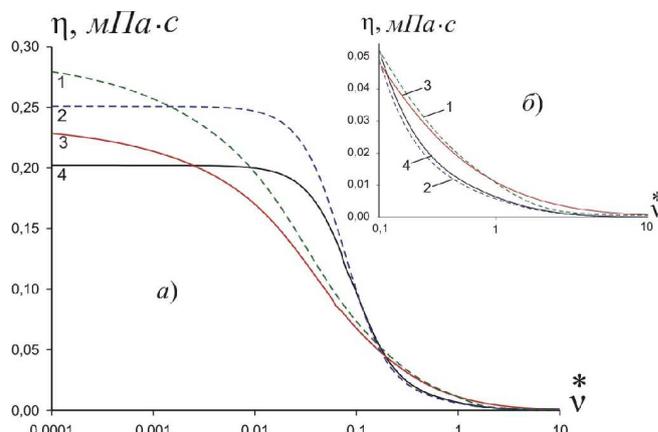


Рис. 2. Частотная зависимость сдвиговой вязкости  $\eta_s(\nu)$  при  $T = 84 \text{ K}$  и  $T = 90 \text{ K}$ , 1, 3 – численные результаты согласно формулы (7), 2, 4 – согласно формулы (12)

Область частотной дисперсии  $\eta_s(\omega)$  на основе диффузионного механизма, т.е. формулы (7), является широкой  $\sim 10^5$  Гц, что и соответствует экспериментальным выводам работы [2] о вкладе структурной релаксации в вязкие свойства жидкостей. В то же время область частотной дисперсии  $\eta_s(\omega)$ , полученная на основе экспоненциального закона затухания вязкого тензора напряжения, т.е. формулы (12), яв-

**Т а б л и ц а 2**

$T, \text{ K}$	$\rho, \text{ кг/м}^3$	$\eta_S, \text{ мПа}\cdot\text{с}$		
		[14]	форм. (7)	форм. (12)
83,86	1414	0,300	0,292	0,252
84	1413,5	0,295	0,291	0,251
85	1407	0,285	0,280	0,242
86	1401	0,276	0,270	0,233
88	1388	0,259	0,251	0,217
90	1376	0,243	0,236	0,202
93	1357	0,226	0,214	0,183
95	1344	0,216	0,201	0,171
97	1331	0,207	0,189	0,161

ляется узкой  $\sim 10^2$  Гц, что соответствует как акустическим экспериментальным, так и теоретическим результатам, полученным на основе феноменологической теории [2, 3]. Видимо, это отличие обусловлено тем, что при низких частотах  $\eta_s(\omega)$  согласно (7) имеет асимптотика  $\sim \omega^{1/2}$  и частотная дисперсия начинается рано, а при высоких частотах  $\eta_s(\omega)$  затухает по наиболее медленному закону  $\sim \omega^{-1}$ . Однако, согласно формуле (12), при низких частотах сдвиговая вязкость является статической, а при высоких частотах  $\eta_s(\omega) \sim \omega^{-2}$ , которая совпадает с результатами формул (6.30) или (6.42) работы [2]. Следовательно, определение области частотной дисперсии коэффициента сдвиговой вязкости тесно связано с механизмом рассасывания внутренних релаксирующих потоков в жидкостях.

1. М. Корнфельд, *Упругость и прочность жидкостей* (Гос. изд. технико-теорет. лит-ры, Москва, 1951).
2. И.Г. Михайлов, В.А. Соловьев, Ю.П. Сырников, *Основы молекулярной акустики* (Наука, Москва, 1964).
3. *Физическая акустика: Свойства газов, жидкостей и растворов*, под ред. У. Мэзона (Мир, Москва, 1968).
4. Б.Дж. Олдер, У.Э. Алли, *Обобщенная гидродинамика. Физика за рубежом. Серия А* (Мир, Москва, 1986).
5. С. Одинаев, А.А. Адхамов, *Молекулярная теория структурной релаксации и явлений переноса в жидкостях* (Дониш, Душанбе, 1998).
6. M.H. Ernst, E.H. Nauge, and M.J. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1254 (1970).
7. И.З. Фишер, *ЖЭТФ* **61** 1647 (1971).
8. Y. Romeau, *Phys. Rev. A* **5**, 2569 (1972); **7**, 1134 (1973).
9. А.А. Адхамов, С. Одинаев, *УФЖ* **29**, 1517 (1984).
10. А.Н. Лагарьков, В.М. Сергеев, *УФН* **125** 409 (1978).
11. Д.Дж. Эванс, Г.Дж. Хенли, З. Гесс, *Физика за рубежом. Серия А* (Мир, Москва, 1986).
12. D.J. Evans and G.P. Morris, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids* (Academic Press, London, 1990).
13. С.А. Михайленко, Б.Г. Дударь, В.А. Шмидт, *ФНТ* **1**, 224 (1975).
14. P. Malbrunot, A. Boyer, and E. Charles, *Phys. Rev. A* **27**, 1523 (1983).
15. Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд, *Молекулярная теория газов и жидкостей* (Иностранная литература, Москва, 1961).

16. *Физика простых жидкостей*, под ред. Г. Темперли и др. (Мир, Москва, 1971), том 1; (Мир, Москва, 1973), том 2.
17. И.Р. Юхновский, М.Ф. Головкин, *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наукова думка, Киев, 1980).
18. С. Одинаев, Д. Акдодов, Х. Мирзоаминов, *ДАН РТ* **52**, 928 (2009).
19. С. Одинаев, Х. Мирзоаминов, *УФЖ* **55**, 1105 (2010).

Получено 07.07.10

ПРО ВИЗНАЧЕННЯ ОБЛАСТІ ЧАСТОТНОЇ ДИСПЕРСІЇ КОЕФІЦІЄНТІВ ПЕРЕНОСЕННЯ КЛАСИЧНИХ РІДИН ЗАЛЕЖНО ВІД ПРИРОДИ ЗАТУХАННЯ РЕЛАКСУЮЧИХ ПОТОКІВ

С. Одинаев

Резюме

Розглянуто область частотної дисперсії динамічного коефіцієнта зсувної в'язкості  $\eta_s(\omega)$  простих рідин, що отриманий методом кінетичних рівнянь, коли відновлення рівноважної структури рідини відбувається за законом дифузії або експоненціально. За певного вибору потенціалу міжмолекулярної взаємодії  $\Phi(|\mathbf{r}|)$  і рівноважної радіальної функції розподілу  $g_0(|\mathbf{r}|)$  проведено числові розрахунки  $\eta_s(\omega)$  для рідкого аргону залежно від густини  $\rho$ , температури  $T$  та частоти  $\omega$ . Теоретично обчислені результати для зсувної в'язкості  $\eta_s(\omega)$  добре узгоджуються з експериментальними даними. Показано, що область частотної дисперсії  $\eta_s(\omega)$  на основі дифузійного механізму, тобто структурної релаксації, широка  $\sim 10^5$  Гц, а у випадку експоненційного затухання в'язкого тензора напруги – вузька  $\sim 10^2$  Гц, що відповідає як акустичним вимірам, так і результатам феноменологічної теорії.

DETERMINATION OF THE FREQUENCY DISPERSION REGION OF THE TRANSPORT COEFFICIENTS OF CLASSICAL LIQUIDS DEPENDING ON THE CHARACTER OF ATTENUATION OF RELAXING FLOWS

S. Odinaev

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

Summary

We consider the frequency dispersion region of the dynamic shear viscosity coefficient  $\eta_s(\omega)$  of simple liquids obtained by the method of kinetic equations, where the equilibrium structure of a liquid is restored according to the diffusion law or exponentially. At a certain choice of the intermolecular interaction potential  $\Phi(|\mathbf{r}|)$  and the equilibrium radial distribution function  $g_0(|\mathbf{r}|)$ , the coefficient

$\eta_s(\omega)$  for liquid argon was numerically calculated as a function of the density  $\rho$ , temperature  $T$ , and frequency  $\omega$ . The obtained theoretical values of the shear viscosity  $\eta_s(\omega)$  are in a satisfactory quantitative agreement with experimental data. It is shown that the frequency dispersion region of  $\eta_s(\omega)$  obtained on the ba-

sis of the diffusive mechanism, i.e. structural relaxation, is large ( $\sim 10^5$  Hz). In the case of the exponential attenuation of the viscous stress tensor, this region is narrow ( $\sim 10^2$  Hz), which agrees both with acoustic measurements and the results of a phenomenological theory.