

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного Совета 6D.KOA-056 при Таджикском национальном университете по диссертации Абдурасулова Анвара Абдурасуловича на тему «**Статистическая теория релаксационных явлений и динамических процессов переноса в жидкостях с произвольными формами молекул**» на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

Актуальность темы. Жидкости являются одной из наиболее распространённых форм вещества в природе и активно участвуют в различных физических, химических и биологических процессах. Они часто находятся в неравновесных динамических состояниях, при которых их теплофизические свойства существенно зависят от частоты внешних возмущений и механизмов внутренних релаксационных процессов. Обычная гидродинамика не позволяет учесть эти особенности, тогда как обобщённая, основанная на неравновесной статистической теории, учитывает молекулярную структуру жидкостей и расширяет область применения до микроскопических масштабов. Поэтому исследование динамических свойств переноса в сложных жидкостях остаётся одной из приоритетных задач физики жидкого состояния.

Связь темы диссертации с выполнением государственных тем и научных программ: Результаты диссертации входили в итоговые и календарные отчёты плановых НИР кафедры физики Таджикского технического университета имени академика М.С. Осими, вошли в итоговые отчёты государственных тем Физико-технического института им. С. У. Умарова НАНТ Инв. № Б.902532 1981 г., Инв. № 02860011086 1986 г., ГН № 01.07.003382 199 г. ГР № 000 000 671 199-2003 гг.

Тема диссертационной работы соответствует Перечню, в который включены приоритетные направления научных и научно-технических исследований (Согласно Постановлению Правительства РТ №503 от 26.09.2020 г.) и в период до 2030 г. (Согласно Постановлению Правительства РТ №114 от 25.02.2025 г.).

Задачи исследования:

- значительным увеличением числа динамических величин, определяющих неравновесное состояние жидкой системы и более корректным учётом угловых координат для описания положения сложных молекул в фазовом пространстве, обобщить метод НФР для исследования явлений переноса и релаксации в сложных асимметричных жидкостях;

- выбирать в качестве физической модели сложных жидких систем, жидкой системы, состоящей из жёстких молекул произвольной формы, с массами m и моментом инерции I ; сформулировать последовательную, внутренне согласованную и более общую модель жидкости, чем модель жидкостей из твёрдых сферических молекул;

- сформулировать замкнутые системы уравнения обобщенной гидродинамики, позволяющие исследовать динамические процессы переноса массы, импульса и момента импульса в сложных жидких системах, состоящих из жёстких молекул произвольной формы; упростить полученные аналитические результаты для описания свойства динамических параметров переноса в простых одноатомных и многоатомных жидкостях, а также в нематических жидких кристаллах;

- исследовать особенности поведения динамических параметров переноса рассматриваемых моделей жидкостей, при предельно высокочастотных и предельно низкочастотных динамических процессах; также в релаксационных областях ($\nu\tau \sim 1$);

- провести численные расчёты закономерностей зависимости динамических параметров переноса одноатомных и многоатомных жидкостей, а также нематических жидких кристаллов от температуры, плотности, давления и частоты внешнего возмущения; сопоставить результаты с экспериментальными данными.

Научная новизна исследования:

Методы и объекты исследования классические и использованы многими исследователями. Предложенная более общая модель сложных жидких систем, состоящих из жёстких молекул произвольной формы и обобщённое выражение НФР с учётом не сохраняющихся динамических величин с использованием угловых координат, являются относительно новыми. Все приведённые в диссертации результаты на основе их использования, получены автором впервые. В частности

1. Предложена более общая, чем модель простых жидкостей, состоящих из упругих сферических молекул, модель сложных жидкостей, состоящая из одинаковых жёстких молекул произвольной формы.

2. Значительным увеличением числа динамических величин, характеризующих неравновесное состояние жидкой системы и учётом угловых координат для описания положения несферических молекул в фазовом пространстве, метод НФР обобщён для описания динамических процессов переноса и релаксационных явлений в сложных асимметричных жидкостях.

3. Сформулирована замкнутая компактная система уравнений баланса динамических величин, характеризующих неравновесное состояние жидкой системы и выражение для НФР, которые позволяют корректно учитывать

вклады, как гидродинамических, так и релаксационных источников в временные эволюции динамических параметров состояния жидкой системы, при равновесных, локально-равновесных и неравновесных процессах;

4. Получена замкнутая система уравнения обобщённой гидродинамики, позволяющая исследовать динамические процессы переноса массы, импульса, и момента импульса в сложных асимметричных жидкостях, с учётом вкладов, происходящих в них внутренних термических релаксационных процессов и частоты внешних возмущений.

5. Проведён анализ молекулярных механизмов, происходящих в асимметричных жидкостях внутренних релаксационных процессов. Показано, что все содержащиеся в уравнениях обобщённой гидродинамики асимметричных жидкостей характерные времена релаксации, выражаются через три основные характерные времена - трансляционные (τ_t), вращательные (τ_r) и прекрестные (τ_{tr}) релаксационные процессы.

Исследованы докинетические межмолекулярные процессы и выявлено, что на промежутках времени между столкновениями на сложные несферические молекулы со стороны соседних молекул действуют случайные силы $F(t)$ и моменты сил $N(t)$, которые делают их движения возмущёнными и диссипативными. Эти диссипации учитываются через соответствующие равновесные корреляторы $\langle F(0)F(t) \rangle_0$, $\langle N(0)N(t) \rangle_0$, $\langle F(0)N(t) \rangle_0$ в выражениях характерных времен релаксации и обеспечивают необратимость уравнения переноса в рассматриваемых моделях жидкостей.

6. Показано, что упрощённые с учётом условия $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}} \cdot \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$, система уравнения обобщённой гидродинамики, удовлетворительно описывает динамические процессы переноса массы и импульса в простых одноатомных жидкостях, состоящих из гладких упругих сферических молекул.

7. Упрощённая, с учётом условия $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}} \cdot \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \gg 1$, система уравнения обобщённой гидродинамики применена для исследования динамических процессов переноса массы, импульса и момента импульса в полярных и неполярных многоатомных жидкостях; получены конкретные аналитические выражения для динамических коэффициентов переноса, учитывающие вклады молекулярной структуры жидкостей и происходящих в них термических релаксационных процессов.

8. Показана возможность существования дополнительных, связанных с не сферичностью молекул коэффициентов вязкости и динамических модулей упругости в многоатомных жидкостях. Выявлено, что в определении свойства динамических параметров переноса многоатомных жидкостей определяющую роль играют перекрытые релаксационные процессы, но в них вносят вклад и все три имеющиеся в рассматриваемой жидкости релаксационные процессы. Кривые дисперсии параметров переноса многоатомных жидкостей содержат, как минимум две релаксационные

области с характерными временами релаксации τ_{tr} и $\tau_{эф} = \frac{10}{3} (\tau_{tr})^2 \frac{\tau_t + \tau_r}{\tau_t \tau_r}$.

9. Проведены численные расчёты зависимостей характерных времён релаксации, коэффициентов внутреннего трения, подвижности, диффузии, термодиффузии, сдвиговой и объёмной вязкости многоатомных жидкостей от температуры, плотности, и частоты внешнего возмущения. Для неполярных многоатомных жидкостей (жидкого азота и жидкого кислорода) использован потенциал парного межмолекулярного взаимодействия молекул Адхамова-Часовских; а для полярных многоатомных жидкостей (жидкого аммиака и воды) потенциал Штокмайера. Получены хорошие согласия теоретических и экспериментальных результатов;

10. Термодинамическим методом исследованы ориентационные аномальные поведения равновесных теплофизических параметров НЖК в окрестности точки фазового перехода НЖК-ИЖ. Определены аналитические выражения для ориентационного параметра порядка, ориентационных аномальных частей теплофизических параметров нематических жидких кристаллов, которые позволяют описать зависимости этих параметров от температуры и давления, в том числе в окрестности точки фазового перехода НЖК-ИЖ.

11. Определены молекулярные компоненты регулярной части теплоёмкости НЖК. Получено общее аналитическое выражение для теплоёмкости НЖК, позволяющее описать зависимость теплоёмкости НЖК от температуры и давления, как в нематической, так и в изотропной фазах. Выявлено одно, из возможных, условие существования ближнего ориентационного порядка (short order) в изотропной окрестности точки фазового перехода НЖК-ИЖ.

12. Термодинамическими и молекулярно-статистическими методами исследованы ориентационные упругие свойства НЖК. Определены аналитические выражения, позволяющие описать закономерность зависимости ориентационных модулей упругости НЖК от температуры и давления при деформациях типа поперечного изгиба (splay), кручения (torsion) и продольного изгиба (band). Полученные результаты проявляют хорошие соответствия между собой и с экспериментальными данными.

13. Упрощённые, с учётом условия $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}} \cdot \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$ уравнения обобщенной гидродинамики, где определяющую роль играют вращательные релаксационные процессы, использованы для исследования динамических ориентационных процессов переноса массы и момента импульса в НЖК. Получены аналитические выражения и проведены численные расчёты закономерностей зависимости коэффициента вращательного внутреннего трения, характерного времени вращательной релаксации, коэффициентов вращательной подвижности, диффузии и термодиффузии, ориентационных

вязкостей, а также соответствующих им динамических модулей упругости от температуры, плотности и давления. Выявлены качественные соответствия теоретических расчётов с экспериментальными результатами.

14. Проанализировано поведение динамических параметров переноса рассматриваемых моделей жидкости при предельно низкочастотных и предельно высокочастотных динамических процессах. Выяснено, что динамические процессы переноса в этих жидкостях, при низкочастотных процессах описываются низкочастотными значениями коэффициентов переноса, механизм переноса является диффузионным и уравнение переноса дифференциальным уравнением второго порядка параболического типа. При высокочастотных процессах динамические процессы переноса характеризуются высокочастотными значениями динамических модулей упругости, механизм переноса становится волновым и уравнение переноса дифференциальным уравнением второго порядка гиперболического типа.

Теоретическая и практическая ценность исследования.

Предложенная в диссертации более общая, чем модель жидкости с упругими сферическими молекулами модель жидкости, может быть использована, как базовая модель при исследовании равновесных и неравновесных теплофизических свойств сложных асимметричных жидких систем.

Упрощённые в 4-6 главах диссертации результаты, не только позволяют исследовать динамические процессы переноса массы, импульса и момента импульса в одноатомных и многоатомных жидкостях, а также в нематических жидких кристаллах, но и позволяют выявить связанные с не сферичностью молекул дополнительные коэффициенты переноса и других эффектов в сложных жидких системах.

Полученные в диссертации аналитические выражения и формулы могут быть использованы для определения и расчёта, как равновесных, так и динамических теплофизических параметров, и коэффициентов переноса асимметричных жидкостей при различных условиях эксплуатации.

Приведённые в диссертации результаты численных расчётов значения теплофизических величин и параметров переноса жидкостей в широком диапазоне изменения температуры, плотности, давления и частоты внешнего возмущения, могут быть использованы, как банк данных о значениях этих параметров при соответствующих условиях эксплуатации рассмотренных классов жидкостей.

Выявленная в диссертации связь теплофизических параметров и динамических коэффициентов переноса жидкостей с формой, размером, массой и энергией взаимодействия молекул, может быть использована, как

физическая основа создания новых жидких материалов с заданными теплофизическими и другими физико-техническими свойствами.

Имеющиеся в диссертации материалы, могут быть полезны докторантам, аспирантам, соискателям, магистрам и студентам старших курсов физических, физико-химических и технологических специальностей при чтении ими спецкурсов, выполнении ими диссертационных и дипломных работ.

Основные положения, выносимые на защиту:

1) физическая модель жидкой системы, состоящая из жёстких молекул произвольной формы:

2) обобщённое значительным увеличением число динамических величин, характеризующие неравновесное состояние жидкой системы, и более корректным использованием угловых координат для описания положения несферических молекул в фазовом пространстве выражения равновесной, локально-равновесной и неравновесной функции распределения молекул;

3) замкнутые системы уравнений обобщённой гидродинамики, позволяющие исследовать динамические процессы переноса массы импульса и момента импульса в асимметричных жидких системах в широком диапазоне изменения параметров состояния и частоты возмущения;

4) упрощённые, с учётом особенностей, структуры конкретных моделей асимметричных жидкостей уравнения обобщённой гидродинамики и выражения для обобщённых динамических коэффициентов переноса простых и многоатомных жидкостей, а также нематических жидких кристаллов;

5) результаты анализа поведения динамических параметров переноса при предельно высокочастотных и предельно низкочастотных динамических процессах, определение условий превалирования переносных или упругих свойств (диффузионного или волнового механизмов переноса) в жидкостях;

6) результаты численных расчётов закономерностей зависимости динамических параметров переноса простых одноатомных и многоатомных жидкостей, а также нематических жидких кристаллов от температуры, плотности, давления и частоты.

Апробация диссертации. Материалы диссертационной работы были представлены и обсуждены на конференциях и симпозиумах международного, республиканского и вузовского уровня.

Личный вклад автора. Направление исследования, цели и задачи диссертационной работы сформулированы вместе с научным консультантом. Некоторые численные расчёты на компьютере проведены совместно с соискателями, аспирантами и соавторами опубликованных работ. Все остальные аналитические расчёты, выводы уравнения и их решения, анализ и оформления результатов в диссертации и в научных публикациях,

результаты, отражённые в разделах «Научная новизна», «Теоретические и практические значения», «Положения, вносимые к защите», «Выводы и заключения» диссертации выполнены лично диссертантом.

Публикации по теме диссертации. Основные результаты диссертации опубликованы в более 85 научных работах, в том числе в 32 реферируемых ВАК-ом при Президенте РТ журналах.

Структура и объем диссертации. Структура диссертации определена в соответствии с целями и задачами исследования и включает введение, шесть глав, заключение, список цитированной литературы (304 наименований). Общий объем диссертации составляет 258 страниц компьютерного набора, количество рисунков 52, таблиц 40.

Диссертация соответствует требованиям пунктов 31, 33 и 34 Порядка присуждения ученых степеней и ученых званий (доцента, профессора), утвержденного Постановлением Правительства Республики Таджикистан от 30 июня 2021 года №267. В ней освещены вопросы, важные для развития науки теоретической физики в Таджикистане.

Диссертация написана автором самостоятельно и имеет внутреннее единство. Результаты и новые научные положения, представленные на защиту, представляют собой личный вклад автора диссертации. Тема и содержание исследования соответствуют паспорту специальности 01.04.02 - Теоретическая физика, согласно которому Диссертационному совету по приказу ВАК при Президенте Республики Таджикистан от 19 января, 2022 года по № 27/шд предоставлено право приема диссертаций на защиту.

Соответствие паспорту научной специальности.

Содержание и результаты диссертационной работы полностью соответствует пункту 1 паспорта специальности 01.04.02 - Теоретическая физика - «Теория конденсированного состояния макроскопических и микроскопических классических и квантовых систем. Исследование различных состояний вещества и физических процессов в них. Статистическая физика и кинетическая теория равновесных и неравновесных систем» и частично соответствует пунктами 5. «Развитие теории и исследование общих свойств и законов нелинейной динамики неравновесных систем» и 6. «Моделирование физических явлений».

На основании пунктов 61 и 62 Типового положения о Диссертационном совете, утвержденного Постановлением Правительства Республики Таджикистан от 30 июня 2021 года № 267, комиссии предлагает:

Исследование соответствует требованиям Реестра специальностей, по которым присуждаются ученые степени в Республике Таджикистан,

утвержденного решением Коллегии ВАК при Президенте Республики Таджикистан от 30 июня 2021 года под № 267.

В диссертационном исследовании Абдурасулова Анвара Абдурасуловича использование материала без ссылки на автора или источник не допускается, все использованные источники оформлены ссылкой на автора или источник посредством цитирования, что является свидетельством соблюдения пунктов 31, 32 и 34 Порядка присуждения ученых степеней и ученых званий (доцент, профессор). Принимая во внимание важность и новизну исследования, теоретическую и практическую значимость диссертации, комиссия пришла к выводу, что диссертация Абдурасулова Анвара Абдурасуловича на тему **«Статистическая теория релаксационных явлений и динамических процессов переноса в жидкостях с произвольными формами молекул»**. - Душанбе. - 2025. - 258 с. является полным и законченным исследованием и соответствует требованиям ВАК при Президенте Республики Таджикистан.

Автореферат диссертации, статьи и тезисы докладов, опубликованные соискателем ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика составляют комплексное содержание общего содержания диссертации.

На основании пунктов 61 и 62 Типового положения о Диссертационном совете, утвержденного Постановлением Правительства Республики Таджикистан от 30 июня 2021 года № 267, комиссия предлагает:

1. Принять к защите на диссертационном Совете 6D.KOA-056 диссертацию Абдурасулова Анвара Абдурасуловича на тему **«Статистическая теория релаксационных явлений и динамических процессов переноса в жидкостях с произвольными формами молекул»** на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

2. **Официальными оппонентами** по диссертации назначить:

Маломуж Николай Петрович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики и астрономии Одесского национального университета имени И.И. Мечникова.

Салихов Тагоймурод Хаитович – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Научно-исследовательского института Таджикского национального университета.

Кабилев Маруф Махмудович – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий отделом прикладной математики и механики Института математики имени А.Джураева Национальной академии наук Таджикистана.

3. В качестве ведущей организации назначить Институт физико-технических наук Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева.

4. Опубликовать объявление о дальнейшей защите и размещение автореферата диссертации на сайте Учреждения и Высшей аттестационной комиссии при Президенте Республики Таджикистан, одновременно дать разрешение на опубликование автореферата диссертации с правами на рукопись.

Председатель комиссии:

д.ф-м.н., доцент



Зарифзода А.К.

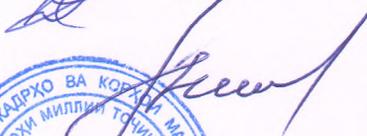
Члены комиссии:

д.ф-м.н., профессор



Джуразода Х.Ш.

д.ф-м.н., профессор



Махсуд Б.И.

Подписи заверяю

Начальник УК и СЧ ТНУ



Тавкиев Э.Ш.

Дата: « 07 » 07 2025