

ТАДЖИКСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УДК.5.32.7. + 532.783

На правах рукописи



БАЛАДЖОНЗОДА СУЛАЙМОНДЖОНИ ДОДАРДЖОН

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЯЗКОУПРУГИХ И АКУСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
КВАЗИСФЕРИЧЕСКИХ И ПОЛЯРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени доктора философии (PhD)- доктора по
специальности 6D060400 – Физика (6D060403 – Теоретическая физика)

Научные руководитель:

доктор физико-математических наук, до-
цент Акдодов Донаёр Мавлобахшович

Душанбе – 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

	Стр.
СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ.....	4
ВВЕДЕНИЕ.....	6
ГЛАВА I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР	16
1.1. Экспериментальных исследования вязкости, модулей упругости и акустических характеристик многоатомных и полярных жидкостей.....	16
1.2. Компьютерное моделирование вязкоупругих и акустических свойств многоатомных и полярных жидкостей.....	25
1.3. Теоретические исследования вязкоупругих и акустических свойств жидкостей.....	37
Заключение к главе 1.....	51
ГЛАВА II. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЯЗКОУПРУГИХ СВОЙСТВ ЖИД- КОСТЕЙ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ С УЧЁТОМ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ	53
2.1. Обобщенное кинетическое уравнение для одночастичной функции распределения.....	53
2.2. Уравнения обобщенной гидродинамики и вязкоупругие свой- ства классических жидкостей.....	60
2.3. Исследование вязкоупругих свойств жидкостей при экспонен- циальном законе затухания релаксирующих потоков.....	64
Заключение к главе 2.....	67
ГЛАВА III. ЧИСЛЕННЫЕ РАССЧЁТЫ КОЭФФИЦИЕНТОВ ВЯЗ- КОСТИ И МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ МНОГОАТОМНЫХ И ПОЛЯРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ.....	68
3.1. Оптимальный выбор потенциала межмолекулярного взаимодей- ствия, радиальной функции распределения и коэффициента трения для многоатомных и полярных жидкостей.....	68

3.2.	Численные расчёты вязкостных и упругих свойств многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами в зависимости от частоты и термодинамических параметров состояния.....	73
3.3.	Численные расчёты зависимости динамических коэффициентов вязкостей и модулей упругости полярных жидкостей от частоты, плотности и температуры.....	83
	Заключение к главе 3.....	103
	ГЛАВА IV. АКУСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МНОГОАТОМНЫХ И ПОЛЯРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ.....	104
4.1.	Исследование акустических свойств полярных жидкостей в зависимости от частоты и термодинамических параметров состояния.....	104
4.2.	Исследование скорости распространения и коэффициента поглощения звуковых волн в многоатомных жидкостях с квазисферическими молекулами.....	115
	Заключение к главе 4.....	119
	ОБЩИЕ ВЫВОДЫ	120
	Рекомендации по практическому использованию результатов.....	121
	ЛИТЕРАТУРА.....	122

УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

$f_1(\vec{x}_1, t)$ – одночастичная функция распределения;

$f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$ – двухчастичная функция распределения;

$\eta_s(\omega)$ – коэффициент сдвиговой вязкости;

$\eta_V(\omega)$ – коэффициент объемной вязкости;

$\mu(\omega)$ – сдвиговой модуль упругости;

$K(\omega)$ – объемный модуль упругости;

$K_r(\omega)$ – релаксационный объемный модуль упругости;

$n_2(\vec{q}_1, \vec{r}_{12}, t)$ – бинарная плотность частиц;

$J_2^\alpha(\vec{q}_1, r, t)$ – бинарный поток частиц;

$\Phi(|\vec{r}|)$ – потенциал межмолекулярного взаимодействия;

$\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b)$ – угловой потенциал межмолекулярного взаимодействия;

$g(|\vec{r}|)$ – радиальная функция распределения;

$y(\rho^*)$ – бинарная функция распределения двух полостей на расстоянии $0 < r < \sigma$;

$y_1(\rho^*, r)$ – бинарная функция распределения двух полостей на расстоянии $\sigma < r < 2\sigma$;

β – коэффициент трения;

$C(\omega)$ – скорость распространения звуковых волн;

$\alpha(\omega)$ – коэффициент поглощения звуковых волн;

CH_4 – метан;

CF_4 – тетрафторметан;

CO_2 – диоксид углерода;

CH_3OH – метиловый спирт;

SCAN – Strongly Constrained and Appropriately Normed (Сильно ограниченная и соответствующим образом нормированная)

NNP – Neural Network Potential (Нейронная сеть потенциальной энергии)

AIMD – Ab Initio Molecular Dynamics (Ab начало молекулярная динамика)

DFT – Density Functional Theory (Теория функционала плотности)

SFA – Surface Forces Apparatus (Теория поверхностных сил)

FWM – Four-Wave Mixing (Четвертной волновой микроскоп)

2CLJD – Two-Center Lennard-Jones Dipole (Модель с двумя центрами с зарядом и джоулевым потенциалом)

УФ – Ультрафиолетовое излучение

УЗ – Ультразвук

SPH – Smooth Particle Hydrodynamics (Гидродинамика гладких частиц)

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования. В условиях развития новых технологий, где точные характеристики жидкостей играют особенную роль, необходимо глубже изучить их поведение под воздействием внешних факторов, таких как температура, давление, внешние поля различных частот и др. В условиях беспрецедентно быстрого развития нанотехнологий и инновационных методов производства точное знание свойств жидкостей становится крайне необходимым для оптимизации процессов и нахождения инновационных решений. В частности, жидкости с многоатомными молекулами, состоящими из двух и более атомов, имеют сложную молекулярную структуру, что и определяет такие их специфические характеристики, как высокие полярность, вязкость и способность к образованию водородных связей.

Полярными называют жидкости, в молекулах которых существует разделение зарядов, то есть дипольный момент. Такое разделение возникает из-за того, что электроны в ковалентных связях распределяются между атомами неодинаково. Полярность жидкостей определяется пространственной структурой их молекул. В технических и природных средах жидкости испытывают влияние различных внешних факторов, что часто приводит к нарушению их динамического равновесия. Исследования показывают, что при высокоскоростных воздействиях жидкости ведут себя иначе, чем в стабильных условиях или в условиях медленного воздействия. Например, их вязкоупругие и акустические характеристики отличаются от условий медленных или равновесных процессов. Поведение упомянутых характеристик определяется, как характером внешнего частотного воздействия, так и особенностями течения релаксационных процессов в самой жидкости.

Степень изученности научной темы. Для адекватного теоретического описания динамических свойств полярных и многоатомных жидкостей необходимо использовать строгие методы статистической теории жидкого

состояния, которые учитывают их молекулярную структуру и внутренние релаксационные процессы протекающих в них. В этом направлении основными являются ряд научных работ зарубежных ученых [1, 6, 8, 9, 11, 13, 14, 53-56, 59, 65, 66, 109, 113, 114, 159, 162, 166 и др.], а также отечественных ученых [106-108, 127-129 и др.]. Такие исследования позволяют более глубоко понять механизмы, определяющие динамическое поведение жидкостей. Поэтому одной из ключевых задач теории жидкого состояния является применение молекулярно-кинетического подхода к динамическим явлениям. Эта задача является основным направлением настоящего исследования и основой для дальнейших научных разработок в данной области.

Связь исследования с программами и научной тематикой. Диссертационная работа выполнена в 2021-2025 гг. в соответствии с тематикой научных исследований кафедры теоретической физики Таджикского национального университета по теме «Теоретическое исследования вопросов физики жидкостей, газов и плазмоподобных сред». Она соответствует приоритетным направлениям (программам) научных и научно-технических исследований в Республике Таджикистан на период до 2030 года (Приложение к постановлению Правительства Республики Таджикистан от 28 февраля 2025 года, № 114), подразделам 13. «Математика и фундаментальные науки (исследования в области теоретической физики, математики и их приложений. Использование математики в прогнозировании техногенных и природных процессов, инженерном проектировании и других современных направлениях)».

Цель исследования - является развитие и применение метода кинетического уравнения для исследования динамических вязкостных и акустических характеристик полярных и многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами. В процессе исследования принималась во внимание угловая ориентация сложных молекул, что позволяет более точно оценить структурные особенности, а также динамику внутренних состояний жидкостей.

Задачи исследования:

-получение аналитических выражений для динамических модулей упругости и коэффициентов вязкости жидкостей с учётом релаксационных процессов при наличии диффузионного или экспоненциального закона затухания потоков;

-выбор потенциалов взаимодействия частиц, модельно-теоретической радиальной функции распределения и коэффициентов трения для многоатомных и полярных жидкостей;

-проведение численных расчетов коэффициентов сдвиговой и объемной вязкостей и модулей упругостей многоатомных и полярных жидкостей в широком интервале изменения термодинамических параметров и частоты внешнего воздействия;

-исследование частотной дисперсии акустических параметров сложных (многоатомных и полярных) жидкостей с учетом природы затухания релаксирующих потоков;

-проведение численных расчетов скорости распространения и коэффициента поглощения акустических волн в широком диапазоне изменений термодинамических параметров и частоты внешнего воздействия в многоатомных и полярных жидкостях.

Объект исследования является динамические вязкоупругие и акустические свойства многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами и полярных жидкостей. Анализируются их поведение при различных внешних воздействиях, особое внимание уделяется молекулярной структуре и типу межмолекулярного взаимодействия.

Предмет исследования являются теоретические зависимости вязкоупругих и акустических свойств квазисферических и полярных жидкостей от их молекулярной структуры, внешних условий и внутренних характеристик системы.

Теоретический основы исследования включает в себя методы кинетического уравнения, численных расчетов с применением современных компьютерных программных средств, а также другие подходы, позволяющие

моделировать и анализировать динамические и акустические свойства жидкостей. Перечисленные методы позволяют корректно вычислять любые задаваемые параметры и детально исследовать их зависимости от различных внешних и внутренних факторов.

Научная новизна:

-проведены численные расчёты зависимостей коэффициента трения β и времен релаксации τ и τ_0 в многоатомных и полярных жидкостях с учетом потенциала межмолекулярного взаимодействия (потенциалов Ленард-Джонса и Штокмайера) и модельных аспектов радиальной функции распределения от термодинамических параметров и ориентации молекул.

-показано, что ширина частотной дисперсии коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_V(\omega)$ вязкостей, а также модулей сдвиговой $\mu(\omega)$ и объемной $K(\omega)$ упругостей определяется характером затухания релаксирующих потоков: при диффузионном законе затухания наблюдается более широкая область дисперсии ($\sim 10^5$ Гц), в то время как при экспоненциальном затухании область существенно сужается ($\sim 10^2$ Гц), что отражает различие во временной структуре релаксационных процессов;

-установлено, что при исследовании частотных зависимостей в области $\omega\tau \ll 1$, которая является характерной для диффузионного механизма затухания, $K(\omega)$ стремится к адиабатическому значению K_s , а $\mu(\omega)$ уменьшается по закону $\sim \omega^{\frac{3}{2}}$; коэффициенты $\eta_s(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$ стремятся к статическим значениям η_s и η_V по закону $\sim \omega^{\frac{1}{2}}$; в высокочастотной области ($\omega\tau \gg 1$) напротив, наблюдается спад вязкостей $\eta_s(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$ пропорционально $\sim \omega^{-1}$, а значения $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ не зависят от частоты внешнего воздействия и находятся в соответствии с теорией Цванцига;

-показано, что при $\omega\tau \ll 1$ и экспоненциальном механизме релаксации $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ приближаются к асимптотическим значениям, а коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей $\eta_s(\omega)$, $\eta_V(\omega)$ сохраняют статический характер (η_s и η_V). В области высоких частот ($\omega\tau \gg 1$) модули $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ становятся постоянными, а коэффициенты вязкостей $\eta_s(\omega)$, $\eta_V(\omega)$ убывают

по закону $\sim \omega^{-2}$, что согласуется с положениями общей релаксационной теории;

-доказано, что во всех рассматриваемых жидкостях с квазисферическими молекулами и полярных жидкостях релаксационные процессы обусловлены взаимодействием трансляционных движений молекул и их структурной перестройкой, что определяет характер отклика жидкостей на внешнее воздействие;

-установлено, что ширина частотной дисперсии скорости распространения и коэффициента поглощения акустических волн в многоатомных и полярных жидкостях определяется характером затухания релаксирующих потоков: а) при диффузионном процессе $\sim 10^5$ Гц, а при экспоненциальном процессе $\sim 10^2$ Гц, что соответствует как акустическим данным, так и результатам общей релаксационной теории.

Положения, выносимые на защиту:

- частотная дисперсия коэффициентов вязкостей $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$, модулей упругостей $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ при диффузионном и экспоненциальном характерах затухания релаксирующих потоков;

-закономерности поведения $K(\omega)$ и $\mu(\omega)$, а также $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$ в низкочастотной и высокочастотной областях;

- поведение модулей упругостей $K(\omega)$ и $\mu(\omega)$, коэффициентов вязкостей $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$ при предельных значениях $\omega\tau \gg 1$ и $\omega\tau \ll 1$;

-связь релаксационных процессов в жидкостях с квазисферическими молекулами и полярных жидкостях с трансляционными движениями молекул и их структурной перестройкой при взаимодействии с внешних полей.

Теоретическая и практическая значимость исследования заключается в том, что понимание вязкоупругих и акустических свойств жидкостей с квазисферическими и полярными молекулами способствует раскрытию тонкой структуры молекулярного строения в условиях внешнего возмущения. Разработка теоретических моделей, описывающих влияние молекулярной структуры и внешних факторов (угловой ориентации молекул, температуры, плотности) на акустические свойства жидкостей способствует

уточнению существующих теорий вязкоупругого поведения и распространения акустических волн в полярных и квазисферических жидкостях, что является новым взглядом на физические свойства подобных систем.

Практическая значимость исследований позволяют оценить и определить численные значения вязкоупругих и акустических свойств многоатомных и полярных жидкостей при разных видах внешнего воздействия. Результаты проведённых вычислений дополняют существующие сведения о вязкоупругих и акустических характеристиках исследуемых жидкостей. Это даёт возможность учитывать особенности их поведения при разных режимах эксплуатации, выявлять связь свойств данных жидкостей с их молекулярным строением и оптимизировать условия работы различных технологических установок. Материалы диссертации могут быть полезными студентам физических, химических и др. специальностей при выполнении дипломных и магистерских работ, соискателям, докторантам и аспирантам.

Степень достоверности результатов диссертации подтверждается высокой корректностью использованных аналитических выражений кинетических уравнений для одно- и двухчастичных функций распределения, уравнения для бинарной плотности типа Смолуховского, использованных потенциалов межмолекулярного взаимодействия и численных расчётов, хорошо согласующимися с экспериментальными данными и принципами общей релаксационной теории.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности: тема, методы исследования и предложенные научные положения, соответствуют паспорту научной специальности 6D060403-теоретическая физика (физика и математика) в части п. 1 «Теория конденсированного состояния макроскопических и микроскопических классических и квантовых систем. Изучение различных состояний вещества и физических явлений в них. Статистическая физика и кинетическая теория равновесных и неравновесных систем», в части п. 5 «Развитие теории и исследование общих свойств и законов

нелинейной динамики неравновесных систем», в части п. 6 «Моделирование физических явлений».

Личный вклад соискателя учёной степени в подготовке диссертации является определяющим в выборе методов и разработке алгоритмов решения поставленных задач, установлении основных закономерностей протекания динамических процессов в жидкостях, проведении численных расчетов с использованием новейших компьютерных программных средств, обработке, анализе и интерпретации результатов.

Апробация и внедрение. Основные результаты работы изложены на: 6th International Scientific and Practical Conference «Science, Education, Innovation: Topical Issues and Modern Aspects», 2022. (April 16-18, 2022). Tallinn, Estonia; республиканской научно-практической конференции «Взаимосвязь науки с производством в процессе ускоренной индустриализации Республики Таджикистан», Душанбе, 2022, (22-23 апреля 2022г.); республиканской научно-практической конференции «Математическое и компьютерное моделирование физических процессов», посвященной «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования». Душанбе, 2023, (9 февраля 2023г.); международной научно-практической конференции «Новые достижения в области естественных наук и информационных технологии», посвященной «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук на 2020-2040 гг.». Душанбе: изд-во «РТСУ», 2023, (30 май 2023г.); международной научно-практической конференции «Современные проблемы физики и химии полимеров», посвященной 75-летию образования Таджикского национального университета и 20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 гг.), (Душанбе, 10 октября 2023); республиканской научно-практической конференции «Проблемы и тенденции развития точных, математических и естественных наук», посвященной двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 гг.), (Душанбе,

28 мая 2024 года); республиканская научно-практическая конференция «Актуальные проблемы физики конденсированного состояния», посвященная 35-летию государственной независимости Республики Таджикистан и «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования», 80-летию профессора Шерматова М., 85-летию профессора Джамолова М. (Худжанд, 20-21 мая 2024); международной научной конференции «Физические и технические науки в пространстве СНГ: проблемы и перспективы развития», (Душанбе, 29–30 ноября 2024); международной научно-практической конференции «Проблемы и перспективы развития физических наук», (Худжанд, 11-12 марта 2025); международной научно-практической конференции на тему «Современные проблемы физики полупроводников и диэлектриков», посвящённой 20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в 2020-2040гг» в области науки и образования и 35-летию кафедры физической электроники Таджикского национального университета (Душанбе, 30 апреля 2025).

Публикации по теме диссертации: По результатам работы опубликовано всего 16 работ, из которых 5 статей в изданиях из Перечня ВАК при Президенте Республики Таджикистан, 1 статья в другом издании и 10 работ в материалах международных и республиканских конференций.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, списка литературы и приложения. Работа опубликована на 140 страницах машинописного текста, включая 9 таблиц, 31 рисунков и список литературы из 173, наименований.

Ключевые слова: многоатомные и полярные жидкости, функция распределения, потенциал взаимодействия, поток, релаксация, акустика.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы исследования, сформулированы цели и задачи работы, дана оценка степени изученности проблемы выбраны объект и предмет исследования, выделены научная

новизна, выносимые на защиту положения, теоретическая и практическая значимость исследования.

В первой главе изложен обзор экспериментальных, теоретических и численных исследований по вязкоупругим и акустическим свойствам различных жидкостей. Показано, что существующие теоретические методы и методы компьютерного моделирования в недостаточной степени описывают динамические свойства жидкостей с учётом внутренних релаксационных процессов.

Вторая глава посвящена исследованию вязкоупругих свойств жидкостей, в которых релаксирующие потоки затухают по степенному и экспоненциальному законам. Приведены кинетические уравнения для одно- и двухчастичных функций распределения, а также уравнения для бинарной плотности типа Смолуховского. Анализируется общее решение уравнения Смолуховского, учитывающее затухание релаксирующих потоков, приводятся аналитические выражения для динамических модулей сдвиговой $\mu(\omega)$ и объёмной $K(\omega)$ упругостей, а также для коэффициентов сдвиговой ($\eta_s(\omega)$ и объёмной $\eta_v(\omega)$) вязкостей.

В третьей главе представлены результаты численных расчетов зависимостей коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объёмной $\eta_v(\omega)$ вязкостей, модулей сдвиговой $\mu(\omega)$ и объёмной $K(\omega)$ упругостей жидкого метана (CH_4), тетрафторметана (CF_4) и диоксида углерода (CO_2) от температуры, плотности и частоты внешнего воздействия, с учётом выбранных моделей межмолекулярного взаимодействия $\Phi_{ab}(|\vec{r}|)$ и радиальной функции распределения $g_{ab}(|\vec{r}|)$. При этом для бинарной функции распределения двух полостей $y(\rho^*)$ в $g_{ab}(|\vec{r}|)$ на расстояниях $0 < r < \sigma$ использовано выражение из работ Карнахана и Старлинга, а на расстояниях $1 < r < 2$ (т. е. $\sigma < r_{12} < 2\sigma$) $y(\rho^*, r)$ принято выражение Вертхейма. Проведено сравнение результатов численных расчетов с экспериментом. Для полярных жидкостей потенциал межмолекулярного взаимодействия $\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b)$ принят в виде потенциала Штокмайера, а аналитическое выражение радиальной функции распределения дано как функция температуры, плотности и ориентации

полярных молекул $g(r, \theta, n, T)$. Функция $y(\rho^*)$ на расстоянии $0 < r < \sigma$ принята в виде функции Карнахана и Старлинга, а на расстоянии $1 < r < 2$ (т. е. $\sigma < r_{12} < 2\sigma$) в виде выражения Вертхейма. Численные расчеты зависимостей $\eta_s(\omega)$, $\eta_v(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ в широком интервале температур, плотностей и частот были проведены на примере полярных жидкостей CH_3OH и H_2O . Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментом.

В четвертой главе исследованы акустические свойства многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами и полярных жидкостей с учетом влияния природы затухания релаксирующих потоков. Проведены численные расчёты зависимости скорости звука и коэффициента поглощения для многоатомных и полярных жидкостей в широком интервале температур, плотностей и частот. В численных расчётах для полярных жидкостей потенциал межмолекулярного взаимодействия $\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b)$ выбран в виде потенциала Штокмайера, включающего в себя ориентацию полярных молекул, их температурную и плотностную зависимости. Для многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами потенциал межмолекулярного взаимодействия был выбран в виде потенциала Леннард-Джонса. Результаты численных расчетов хорошо согласуются с экспериментом и принципами общей релаксационной теории.

ГЛАВА I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1. Экспериментальных исследования вязкости, модулей упругости и акустических характеристик многоатомных и полярных жидкостей

Вязкоупругость - свойство веществ, которое характеризуется способностью проявлять одновременно как вязкие, так и упругие деформации. Вязкость отвечает за относительное движение слоев жидкости, тогда как упругость - за изменение формы или объема жидкости при внешних нагрузках. Эти два явления являются ключевыми для понимания поведения жидкостей в различных условиях и имеют непосредственное влияние на их физические и химические свойства.

Экспериментальному, модельному и теоретическому исследованию вязкоупругих свойств жидкостей посвящено большое количество работ [1-136]. Известно [1], что в интервале температур ниже температуры кипения логарифм вязкости жидкости изменяется линейно и обратно пропорционально температуре:

$$\ln \eta = A + (B/T) \text{ или } \eta = A \exp(B/T),$$

где постоянные A и B определяются эмпирически. При температурах выше точки кипения зависимость $\ln \eta$ от $(1/T)$ становится нелинейной и описывается набором полуэмпирических методов, включая те, которые основаны на принципе закона соответствующих состояний. В работах [2,3] представлены данные о вязкости жидкостей, предложены полутеоретические и эмпирические модели для оценки вязкости жидкостей.

Авторами [4] исследовано вязкоупругое поведение дифталата (2-этилгексил) и бис (м-(м-феноксифенокси) фенил) эфира в зависимости от давления в условиях переменного сдвига. Сопротивление сдвигу измерялось на частотах 10 и 30 МГц. Для ди (2-этилгексил) фталата диапазон давления составлял до 1400 МН/м², а для бис (м-(м-феноксифенокси) фенил) эфира - до 300 МН/м². Дополнительно проводились измерения плотности (ρ) и вязкости в установившемся течении (η) каждой жидкости в зависимости от

давления; данные по вязкости охватывали диапазон от 0,001 до 300 Н·с/м². Предельный модуль сдвига G_{∞} каждой жидкости оказался линейно зависящим от давления, при этом, в пределах экспериментальной погрешности, вязкоупругое релаксационное поведение может быть описано уравнением, предложенным Барлоу, Эргинсавом и Лэмбом:

$$J^*(j\omega) = J_{\infty} \left(1 + \frac{1}{j\omega\tau_m} + \frac{2}{(j\omega\tau_m)^{1/2}} \right),$$

где $J^*(j\omega)$ - комплексная податливость при круговой частоте ω , J_{∞} ($J_{\infty} = 1/G_{\infty}$) - предельная высокочастотная податливость при сдвиге, а τ_m - максвелловское время релаксации, равное η/J_{∞} . Это уравнение достаточно хорошо описывает релаксационное поведение, если учитывать изменения вязкости, плотности и модуля сдвига с давлением и температурой.

В работе [5] исследуется зависимость времени объемной релаксации от температуры и плотности для моделей мягких сфер и потенциала Леннарда-Джонса. Для мягких сфер время релаксации рассчитывается численно на основе уравнения Цванцига–Маунтайна с использованием радиальной функции распределения Хансена и Вайса. Показано, что для мягких сфер время объемной релаксации монотонно убывает с увеличением плотности и возрастает с температурой. Для жидкостей Леннарда-Джонса расчёты выполнены с применением радиальной функции распределения Маттеоли–Мансури. Для изотерм с температурой до $T^* < 2,1$ зависимость времени релаксации жидкостей Леннарда-Джонса от плотности имеет минимум при приведенной плотности около 0,85.

В работе [6] представлен метод измерения объемной вязкости воды с использованием длительности импульсов, возбуждаемых Бриллюэновское рассеяние (SBS). Метод основан на вычислении ширины линии Бриллюэна, которая зависит от вязкости. Измерения проводились при температуре от 5 до 40 °С, а ширина линии определялась с помощью преобразования Фурье временных данных. Полученные результаты подтверждают высокую эффективность метода и его применимость для исследования вязкости других ньютоновских жидкостей.

Методом спинэхо на протонах измерены коэффициенты самодиффузии различных классов полярных растворителей в интервале температур 288-318 К в [7]. В том же температурном интервале измерены или взяты из литературы значения вязкостей и времен диэлектрической релаксации исследуемых жидкостей и рассчитаны энергии активации процессов самодиффузии, вязкого течения и диэлектрической релаксации. Проведено сравнение полученных результатов с литературными данными по временам структурной релаксации в исследуемых растворителях и сделан вывод о роли пространственной сетки водородных связей в подвижности молекул, образующих эту сетку.

С помощью метода акустического резонанса в [8] определен комплексный модуль сдвига суспензий наночастиц диоксида кремния в полиэтилсилоксановой жидкости. Метод основан на изучении влияния сил добавочной связи на резонансные характеристики колебательной системы. Особенности зависимости модуля сдвига от амплитуды деформации обусловлены межмолекулярным взаимодействием в суспензиях, которые определены методом ИК-спектроскопии.

Акустическим резонансным методом в [9] исследована низкочастотная (74 кГц) сдвиговая упругость гомологического ряда нормальных углеводородов (алканов). Измерены модуль сдвига, тангенс угла механических потерь, рассчитаны частота релаксации и эффективная вязкость. Установлены зависимости этих параметров от вязкости гомолога. Показано, что тангенс угла механических потерь у всех исследованных жидкостей меньше 1. Это показывает, что частота релаксации лежит ниже частоты эксперимента.

В работе [10] рассмотрены упругие свойства структурированных жидкостей на интервале низких частот сдвиговых колебаний и низких скоростей сдвига. При очень низких значениях скорости сдвига $\dot{\gamma}$ и частоты ω первую разность нормальных напряжений $N(\dot{\gamma})$ и модуль накопления $G'(\omega)$ невозможно описать уравнениями структурной реологической модели. При более высоких частотах упругие свойства жидкостей описываются

структурной моделью. Такое изменение реологических свойств связано с тем, что в диапазоне низких частот или скоростей отсутствует «упругая» структура, обусловленная «упругими» контактами частиц (макромолекул). Поэтому упругость вещества зависит от свойств одиночных частиц, а само вещество может рассматриваться как сплошная среда и описываться уравнениями, полученными в механике сплошных сред.

В работе [11] с применением акустических методов были измерены основные характеристики жидкого метана (CH_4) и тетрафторметана (CF_4), такие как скорость звука, коэффициенты поглощения, объемная вязкость и времена релаксации вдоль линии насыщения. Выявлено, что температура и плотность влияют на коэффициент поглощения и объемную вязкость через два основных вклада: первый связан с "жесткими" компонентами потенциалов взаимодействия и различиями в локально-равновесной функции распределения на межчастичных расстояниях, второй - с "структурными" эффектами, возникающими из-за дальнедействующих сил и искажения парной функции распределения на больших расстояниях, что приводит к снижению этих величин. В CF_4 дисперсия коэффициента поглощения наблюдается на протяжении всей исследуемой области температур и частот, при этом при низких температурах отмечается слабая дисперсия скорости звука. В CH_4 дисперсия коэффициента поглощения наблюдалась только при температурах выше 140°C .

Изучение акустических характеристик жидкостей с учётом внутренних релаксационных механизмов продолжает активно развиваться в последние годы. Например, в работе [12] представлены теоретические и экспериментальные исследования, подтверждающие возможность использования крутильных колебаний трубки для измерения вязкоупругих свойств жидкостей в диапазоне резонансных частот, характерных для акустического каротажа. Разработанная модель метода устанавливает связь между резонансными характеристиками крутильных колебаний и комплексным модулем сдвига, где вещественная часть соответствует упругому модулю, а мнимая — вязкости жидкости. Для определения этих

параметров необходимы точные измерения резонансной частоты и добротности системы. В случае идеальных жидкостей с нулевым модулем сдвига определение вязкости возможно по одному из этих параметров. Сопоставление экспериментальных данных с теоретической моделью и результатами стандартных методов подтвердило эффективность и надёжность применения предлагаемого подхода для оценки вязкоупругих свойств неньютоновских жидкостей в широком температурном и частотном диапазонах

В работе [13] показана эффективность акустической спектроскопии как метода определения объемной вязкости воды в температурном диапазоне от 7 до 50 °С. Показано, что результаты согласуются с классической теорией акустического поглощения звука. Также отмечено, что акустическая спектроскопия является надежным, воспроизводимым и точным методом для определения объемной вязкости.

Авторы работы [14] резонансным методом в области частот 10^4 – 10^5 Гц измерили модуль сдвига и тангенс угла механических потерь для ряда жидкостей: полиэтилсилоконовых (ПЭС) жидкостей, гликолей, бутилового спирта, тридекана и пентадекана. Выявлено, что действительный модуль сдвига уменьшается с понижением частоты, а тангенс угла механических потерь растет. Результаты показывают, что значения модуля упругости всех исследуемых жидкостей уменьшаются с уменьшением частоты, а тангенс угла механических потерь растет, оставаясь при этом меньше 1.

В работе [15] значительное внимание уделяется описанию методики измерения скорости звука импульсно-фазовым методом и оценке погрешностей измерения. Данные по скорости звука вдоль линии насыщения в широком температурном интервале для трех классов органических жидкостей (предельные углеводороды, алифатические спирты и ароматические углеводороды) представлены в виде таблиц. Исследованы особенности поведения скорости звука и адиабатической сжимаемости жидкости вблизи критической точки, рассмотрена возможность

использования акустических данных для расчета термодинамических свойств жидкостей.

В работе [16] рассмотрены электромагнитные и магнитозвуковые адиабатические волны в намагничивающихся и поляризующихся жидкостях в рамках линеаризованных уравнений. Полученные дисперсионные уравнения описывают две электромагнитные волны, поперечную и продольную звуковые волны.

В работах [17,18] методом наложения эхо-импульсов исследована скорость звука в жидких алкенах от 1-гексена до 1-гексадецена с четным числом атомов углерода в интервале температур от 298 К до 433 К и давлений от 0,10 до 100,10 МПа. Максимальная погрешность измерений составляет 0,1%. Вычислены параметры корреляционных уравнений.

В [19] рассмотрены абсолютная и относительная дифракционные погрешности измерителей скорости звука в жидкостях. Показано, что в режиме постоянной длины звуковой волны могут быть введены дифракционные поправки во всем диапазоне измерения скорости звука по независимым данным в реперной точке при температуре дистиллированной воды максимальной плотности. Благодаря использованию предложенных методических подходов достигается повышение точности определения базового значения скорости звука в жидкостях, включая экстремальные условия по температуре и гидростатическому давлению. Следовательно, создается принципиальная основа для существенного повышения инструментальной точности гидроакустических средств измерения скорости звука в морской среде. В работе [20] рассмотрен подход к децентрализации эталонной базы при измерениях скорости звука в жидкостях, основанный на выражении этой величины в долях скорости распространения света в вакууме. Метод учёта дифракционных искажений основан на измерении скорости звука в режиме постоянной длины волны и калибровке полученных значений с использованием термодинамических расчётов, выполненных независимыми (неакустическими) методами при условии равенства адиабатической и изотермической сжимаемости. Предполагается, что

использование этих принципов и методов повышает точность измерения скорости звука в жидкостях в широком диапазоне температур и давлений.

Работа [21] посвящена распространению и поглощению акустических волн. Применяя закон сохранения энергии для случая взаимодействия высокочастотных акустических волн с проводящей жидкостью, было установлено, что присутствие постоянных электрического и магнитного полей приводит к повышению коэффициента поглощения акустических волн в проводящей жидкости. Выведена формула, устанавливающая связь акустических и теплофизических свойств волн и жидкости с напряженностью электрического и магнитного полей.

Вопросам погрешностей в прямых импульсных методах измерения скорости звука в жидкостях посвящена работа [22]. Особое внимание обращено на перспективные импульсные методы с использованием время-пролетных и цилиндрических пьезоэлектрических акустических систем с многократным отражением импульсов. Оригинальность метода измерения скорости звука в воде заключается в использовании акустической базы, выполненной из пьезоэлектрического цилиндра. Рабочим расстоянием акустической базы является внутренний диаметр цилиндра. Основные функциональные устройства выполняются на элементах цифровой техники. Методом ультразвукового интерферометра в интервале температур от 293 до 373 К при давлениях от 0,05 до 0,5-3,7 МПа в [23] измерена скорость звука в жидком и газообразном хладагенте R-407C. Проведено сопоставление полученных результатов с расчетом скорости звука из фундаментального уравнения состояния для свободной энергии Гельмгольца.

Для определения положения на фазовой диаграмме флюида железа линий равновесия фазовых переходов первого рода авторы работы [24] развили экспериментальную методику по прямому измерению скорости звука в этой жидкости. Методика измерений заключается в том, что образец в форме отрезка фольги помещается между двумя пластинами кварцевого стекла (или сапфира) и нагревается импульсом электрического тока. Такой нагрев представляет собой квазистатический процесс, при котором объем, энтальпия

и давление в образце монотонно возрастают. Скорость звука в конкретном состоянии образца измеряется путём возбуждения акустического возмущения на его поверхности лазерным импульсом. Приход акустической волны на противоположную поверхность фиксируется с использованием лазерного интерферометра. В работе представлены предварительные результаты измерений скорости звука в жидком железе. Эти результаты сравниваются с литературными данными и на основании этого дается оценка погрешности измерений.

В работе [25] с помощью электрофизических и акустоэлектрических методов для контроля физических свойств полярных и неполярных жидких сред проведено измерение параметров модельных систем на основе вазелинового и силиконового масел, а также глицерина. Для акустической части задачи в качестве пьезоэлектрической пластины использовался ST, X-кварц, на котором была размещена ячейка для жидкости из фторопласта. Измерения фазы и амплитуды акустической волны проводились в три этапа: I) без контакта с жидкостью; II) в контакте с чистой исследуемой жидкостью; III) в контакте с исследуемой жидкостью с наполнителем. Вязкость суспензий определялась по разнице затухания акустической волны в присутствии чистой жидкости и жидкости с наполнителем.

В [26] импульсно-фазовым методом в интервале от $-30\text{ }^{\circ}\text{C}$ до критической точки измерена скорость звука на линии насыщения в жидкой фазе 2-метилпентана, 3-метилпентана и 2,2-диметилбутана. Неопределенность полученных значений скорости звука не превышает 1 м/с . Представленные экспериментальные значения скорости звука в жидкой фазе изомеров гексана для широкого интервала температур, включающего критическую точку, позволяют существенно расширить экспериментальную базу данных теплофизических свойств органических веществ. Авторы предполагают, что данные необходимы для решения существующих проблем физики жидкостей - изучения характера межмолекулярных сил и особенностей структуры жидкости.

С помощью акустического интерферометра в работе [27] определена скорость акустической волны в жидкостях с различным акустическим импедансом. Показано, что указанный импеданс определяет отношение резонансных величин максимума и минимума коэффициента прохождения S_{12} для одной и той же пары «излучатель-приёмник» в зависимости от расстояния между преобразователями. Проведённый теоретический анализ позволил определить механический импеданс в плоскости «преобразователь—жидкость» в зависимости от акустического импеданса жидкости. На основе теоретического анализа разработана методика определения затухания жидкости, свободная от влияния «кажущегося» затухания, связанного с уходом части акустической мощности в преобразователи.

В работе [28] исследуются аномальные жидкости, такие как вода и расплавы Te , Se-Te , Ga-Te , Ge-Te , которые проявляют необычные температурные и барические зависимости физических свойств, а также аномальные абсолютные значения для теплоемкости, сжимаемости и скорости звука. Показано, что в «нормальных» жидкостях скорость «быстрого» звука лишь немного превышает обычную и в основном определяется вкладом модуля сдвига. В «аномальных» жидкостях, таких как вода и расплав теллура (Te , Se-Te , Ga-Te , Ge-Te), превышение скорости «быстрого» звука над «нормальным» связано с сильной частотной зависимостью модуля объемного сжатия. Аномально низкие значения релаксирующего модуля сжатия в таких жидкостях обусловлены размытыми фазовыми превращениями, которые также приводят к аномально высоким значениям теплоемкости и сжимаемости. В работе также показано, что для этих жидкостей характерно аномальное (немонотонное) поведение физических свойств и их аномальные абсолютные значения.

В работе [29] рассматривается новый акустоэлектронный метод измерения скорости ультразвуковых волн в жидкости. Показано, что по изменению угла между направлением распространения ультразвуковой волны и нормалью к поверхности пьезокварцевого приемника, помещенного в исследуемую жидкость, можно определить скорость распространения этой

волны в жидкости. Этим методом при частоте волны 3 МГц были измерены скорости звука в дистиллированной воде, глицерине, хладоне. Полученные экспериментальные величины скоростей удовлетворительно согласуются с табличными данными.

1.1. Компьютерное моделирование вязкоупругих и акустических свойств многоатомных и полярных жидкостей

В [30] описан расчет явления переноса жидкости с использованием компьютерного моделирования, основанного на неравновесной молекулярной динамике. С использованием молекулярно-динамического моделирования течения Куэтта получены значения сдвиговой вязкости для частиц, взаимодействующих по мягкому сферическому потенциалу (r^{-12}), а также для частиц с потенциалом Леннарда-Джонса ($r^{-12} - r^{-6}$). Отклонения мягких сфер от теории Энскога аналогичны тем, которые были найдены для твердых сфер исследователями Альдером, Гассом и Уэйнрайтом с использованием временных корреляций колебаний системы молекулярной динамики в равновесии. Для сдвиговой вязкости Леннарда-Джонса в области тройной точки наблюдается согласие между расчетами в равновесии, выполненными Левеском, Верле и Куркиярви, и результатами в состоянии неравновесия, полученными с использованием 108 атомов в кубе. Однако системы, ширина которых составляет два или три куба, дают более низкие результаты, которые, при экстраполяции с учетом обратной ширины, приводят к близкому согласованию с экспериментальными данными для сдвиговой вязкости аргона. Сравнение сдвиговой вязкости Леннарда-Джонса с экспериментальными данными для аргона вдоль линии насыщенного давления пара аргона подтверждает успешное моделирование макроскопического вязкого потока с использованием систем молекулярной динамики с малым числом частиц в неравновесном состоянии. Новым результатом молекулярной динамики в неравновесии является характеристика функций неравновесных распределений, которые могут послужить основой для теории возмущений переноса. Поскольку перенос

импульса в первую очередь осуществляется отталкивающим потенциалом ядра при высоких температурах, сдвиговая вязкость Леннарда-Джонса должна вести себя как система с мягкими сферами при высоких температурах (вязкость, деленная на $(\text{температура})^{2/3}$) является функцией плотности, деленной на $(\text{температура})^{1/4}$. На самом деле, рассчитанная избыточная сдвиговая вязкость (та ее часть, которая выходит за пределы зависимости от плотности при нулевой температуре) успешно коррелирует с помощью переменных масштабирования 12-й степени для температур, близких к критической (вдоль линии замерзания). Использование переменных масштабирования мягких сфер дает относительно простые функции для описания, как избыточной сдвиговой вязкости, так и поведения теплопроводности во всей жидкой фазе. Введение этих переменных масштабирования также ясно выявляет две особенности: 1) слабую зависимость от температуры; 2) температурные зависимости транспортных свойств при фиксированной плотности характеризуются различными знаками производных: сдвиговая вязкость убывает с температурой (отрицательная производная), а теплопроводность, напротив, возрастает (положительная производная). Несмотря на то, что обе эти своеобразности экспериментально выявлены для простых жидкостей, их причина ранее не была связана с доминированием потенциала ядра. Таким образом, переменные масштабирования мягких сфер могут быть полезны для корреляции экспериментальных данных.

Проведены обширные симуляции молекулярной динамики (MD) для жидкостей Леннарда-Джонса (LJ) и мягких сфер (SS) в работе [31]. Сдвиговая вязкость при нулевой скорости сдвига была получена с использованием новой техники молекулярной динамики в неравновесном состоянии, которая включает ортогональные продольные искажения (устраняющие чистые термины расширения или сжатия). Модули сдвиговой упругости для LJ подогнаны с точностью лучше 1 % с использованием простого аналитического выражения. Аналогичное соотношение для сдвиговой вязкости менее удовлетворительно, но это лишь отражает

большую неопределенность в этом коллективном транспортном свойстве. Соотношения Стокса–Эйнштейна с использованием условий скольжения для границ дает эффективный диаметр «единицы потока», который уменьшается от нескольких молекулярных диаметров до одного по мере увеличения плотности. Это предполагает, что движение между молекулой и молекулами в ее первой координационной оболочке становится более кооперативным при умеренных плотностях, что приводит к большему сопряжению молекулярных траекторий. Подтверждение этому дает прямое вычисление коэффициента трения с использованием молекулярной динамики в неравновесном состоянии, радиальных функций распределения и функций корреляции флуктуаций пар. Для этих расчетов использовался алгоритм Верле. Более точный алгоритм Токсварда не показал значительного улучшения точности системной компоненты движения отдельных (и, следовательно, возможно, коллективных) частиц, измеренной с помощью автокорреляционных функций скорости и силы.

Моделирование равновесной молекулярной динамики для Леннард-Джонсовых жидкостей для 171 случаев, охватывающих диапазон $0 \leq p^+ \leq 1.0$ и $0.8 \leq T^+ \leq 4.0$, было выполнено в [32]. Для вычисления коэффициента самодиффузии была использована формула Эйнштейна (или формула среднеквадратичного смещения, MSD), а для вычисления сдвиговой вязкости при каждом условии была использована модифицированная формула. Затем аналитические уравнения для коэффициентов самодиффузии и вязкости были подогнаны к данным симуляций в виде полиномиальных функций от p^+ и T^+ . Полученные уравнения сглаживания хорошо коррелируют с симулированными данными и согласуются с экспериментальными данными для аргона в пределах неопределенности данных.

В работе [33] показано, что существует несколько методов для расчета коэффициента сдвиговой вязкости жидкостей с использованием метода молекулярной динамики. Существуют методы равновесного состояния, основанные на флуктуациях давления или импульса, а также несколько методов неравновесного состояния. Для метода неравновесного состояния с

использованием периодического сдвигового потока все соответствующие величины, включая точность, могут быть оценены до проведения моделирования. Авторы сравнили применимость, точность и эффективность этого метода с двумя методами равновесного состояния и еще одним методом неравновесного состояния, используя моделирование Леннарда-Джонсовых жидкостей и моделей воды SPC и SPC/E (расширенная модель простого точечного заряда).

В работе [34] методом равновесной молекулярной динамики с использованием соотношений Грина–Кубо были вычислены коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей, а также теплопроводность для инертных газов (Ar, Kr, Xe), метана и их бинарных смесей. Для моделирования использовались сферические потенциалы Леннарда-Джонса с параметрами, подобранными по экспериментальным данным фазового равновесия. Полученные значения сдвиговой вязкости и теплопроводности показали хорошее соответствие с экспериментом, как для чистых компонентов, так и для смесей. В то же время, расчёты объемной вязкости результаты оказались менее согласованными, что авторы связывают с трудностями точного её экспериментального измерения.

В [35] было проведено моделирование (методом молекулярной динамики) для жидкой воды в ансамбле NVE (это значит, что количество частиц (N), объём (V) и энергия (E) системы фиксированы) с целью вычисления коэффициентов сдвиговой и объемной вязкостей. Для моделирования димера воды использовались два различных потенциала межмолекулярного взаимодействия: эмпирическая модель SPCE (основана на экспериментальных и эмпирических данных) и ab начальной модель NCC (основана на первых принципах квантовой механики, более точная и теоретически обоснованная). Полученные результаты были сравнены с доступными экспериментальными данными и было показано, что для более точного описания макроскопических свойств жидкости необходимо применять поляризуемые (жесткие или гибкие) потенциалы межмолекулярного взаимодействия.

Исследованию вращательной вязкости хлорной жидкости и жидкости из малых линейных молекул с помощью метода равновесной молекулярной динамики посвящена работа [36]. Вращательная вязкость рассчитывается для широкого диапазона параметров состояния. Было установлено, что вращательная вязкость почти не зависит от температуры в исследуемом диапазоне, но зависит от плотности. Вращательная вязкость также демонстрирует степень зависимости от молекулярной длины, а отношение между сдвиговой и вращательной вязкостями приближается к 0,5 для самой длинной молекулы, исследованной в данной работе. Изменяя число атомов или эквивалентных атомных единиц в молекуле при фиксированной длине молекулы, авторы показали, что жидкости, состоящие из молекул, имеющих форму палочек, обладают более низкой вращательной вязкостью. Они полагают, что это явление связано с уменьшением межмолекулярной связи, что приводит к большему количеству флуктуаций вокруг средних значений, которые имеет жидкость. Сделанные выводы могут быть распространены на жидкости, состоящие из униаксиальных молекул произвольной длины.

Метод переходной молекулярной динамики (TMD) для получения вязкости жидкости был расширен для многосайтовых моделей с силовыми полями как для полярных, так и неполярных жидкостей [37]. Метод накладывает синусоидальный профиль скорости на специфические скорости частиц, а затем записывает переходное затухание профиля скорости. Вязкость получается путем регрессии решения уравнения импульса с соответствующим конститутивным уравнением, начальными и граничными условиями, соответствующими тем, которые использовались в моделировании. Наблюдаемые переходные затухания скорости включали, как эффекты релаксации, так и запаздывания. Модель вязкоупругости Джеффриса оказалась точной для моделирования переходных откликов, полученных для многосайтовых моделей для Н-бутана, изобутана, Н-гексана, воды, метанола и гексанола. Значения вязкости, полученные методом траекторной молекулярной динамики (TMD) для насыщенных полярных жидкостей в широком диапазоне плотностей, демонстрируют хорошее

согласие, как с результатами неравновесной молекулярной динамики (NEMD), использующей те же модели межмолекулярного взаимодействия, так и с эмпирическими корреляциями, основанными на экспериментальных данных. Полученные данные для вязкости неполярных жидкостей, хорошо согласуются с экспериментальными результатами и результатами NEMD при низких и средних плотностях, но занижают экспериментальные значения при более высоких плотностях, где эффекты разжижения при сдвиге и вязкого нагрева могут влиять на моделирование TMD.

Авторами [38] рассмотрен подход временной декомпозиции для вычисления сдвиговой вязкости с использованием формализма Грина-Кубо. Вместо одной длинной траектории запускаются несколько независимых траекторий, а соотношение Грина-Кубо применяется к каждой траектории. Усредненный интеграл по времени подгоняется к двойной экспоненциальной функции с весовой функцией, выведенной из стандартного отклонения интегралов. Такая весовая функция минимизирует неопределенность оцененной сдвиговой вязкости и предоставляет объективный способ оценки вязкости. В то время как формальный интеграл Грина-Кубо требует интегрирования до бесконечного времени, авторы предлагают ограничение времени интеграции TCUT, которое может быть определено относительно значений интеграла и соответствующего стандартного отклонения. Этот подход для вычисления сдвиговой вязкости можно легко автоматизировать и использовать в вычислительных скрининговых исследованиях, где вмешательство человека в анализ данных непрактично. Метод был применен для расчета сдвиговой вязкости относительно маловязкой жидкости- этанола и относительно высоковязкой ионной жидкости- трифторметансульфонил, 1-н-бутил-3-метилимидазо-лия при различных температурах. Эти примеры показывают, что метод является надежным и дает воспроизводимые и точные значения вязкости сдвига.

В [39] вязкость жидкостей в плоском наноканале была изучена методом молекулярной динамики. Эффективный коэффициент вязкости был определен с использованием теоремы флуктуаций-диссипации, выведенной

ранее авторами на основе неравновесной статистической теории переноса жидкости в ограниченных условиях. Было установлено, что вязкость жидкости в наноканале сильно зависит от потенциала взаимодействия между молекулами жидкости и стенками канала. В частности, увеличение глубины потенциальной ямы этого взаимодействия приводит к увеличению вязкости. В то же время, если глубина потенциальной ямы мала, вязкость жидкости в наноканале может быть даже ниже, чем в неограниченной (объемной) системе. Таким образом, вязкость жидкости в наноканале и, следовательно, сопротивление канала потоку могут быть изменены путем изменения материала стенок наноканала.

Согласно [40], объемная вязкость в молекулярных моделях описывается как сумма двух физических механизмов: релаксации внутренних степеней свободы (вклад разбавленного газа) и межмолекулярных взаимодействий (конфигурационный вклад). Первый компонент определяется экспериментально через времена релаксации вращательных и колебательных мод, второй – вычисляется из равновесной молекулярной динамики по формуле Грина–Кубо. Для эталонной жидкости Леннарда-Джонса и реальных веществ (вода, CO_2 , н-декан) изучены различные подходы к моделированию. Установлено, что вклад разбавленного газа становится значимым лишь при характерных временах релаксации порядка микросекунд и низких частотах, как в случае CO_2 . Во всех других случаях доминирует конфигурационная часть, особенно заметная вблизи критической точки, где объемная вязкость резко возрастает.

Как показано в работе [41], объёмная вязкость, являющаяся коэффициентом переноса в уравнении Навье–Стокса, нередко вызывает споры в механике сплошной среды ньютоновских жидкостей. Тем не менее, в последние годы её значение стало более заметным в контексте поверхностных и межфазных явлений, при систематическом масштабировании моделей, а также как важный параметр для интерпретации данных акустических сенсоров. В большинстве случаев расчёт объёмной вязкости осуществляется с использованием молекулярной динамики и

линейной теории отклика Грина–Кубо, которая позволяет оценивать транспортные свойства на основе анализа молекулярных траекторий. Поскольку моделирование проводится при фиксированных термодинамических условиях и сопровождается оценкой других свойств, особенно важным становится тщательное исследование влияния термостатов в молекулярной динамике. В настоящей работе авторы детально анализируют влияние различных схем термостатирования и численных реализаций формализма Грина–Кубо, особенно в рамках канонического ансамбля с использованием двух популярных моделей силового поля воды. Выясняется, что определение объёмной и сдвиговой вязкостей представляет собой весьма чувствительную задачу: как особенности термостатирования, так и численные нюансы могут оказывать влияние на результаты, выходя за пределы статистической неопределённости. На основе полученных данных авторы формулируют рекомендации по построению надёжной выборки для расчёта объёмной вязкости в каноническом ансамбле.

Всестороннее исследование вязкости жидкой воды при условиях, близких к окружающим, выполнено в работе [42] в рамках теории линейного отклика Грина–Кубо и равновесной *ab initio* молекулярной динамики (AIMD), основанной на теории функционала плотности (DFT). Чтобы справиться с необходимостью длительного моделирования для достижения приемлемой статистической точности, предложенный авторами *ab initio* подход был дополнен использованием потенциальных функций, построенных с помощью глубоких нейронных сетей (NNP). Этот подход сначала проверяется на основе результатов AIMD, полученных с использованием обменно-корреляционного функционала Пердью–Берка–Эрнцергофа (PBE) с особым вниманием к важным, но часто упускаемым из виду аспектам статистического анализа данных. Затем авторы обучали второй NNP на наборе данных, сгенерированном с использованием функционала Strongly Constrained and Appropriately Normed (SCAN). После того как ошибка, возникающая из-за несовершенного прогноза линии плавления компенсируется путём сопоставления моделируемой температуры

с теоретической температурой плавления, тогда прогнозы сдвиговой вязкости воды, основанные на функционале SCAN, оказываются в очень хорошем согласии с экспериментальными данными.

Изменения вязкости в ограниченных жидкостях были исследованы с использованием экспериментальных методов в работе [43], включая аппарат поверхностных сил (SFA) и метод колебания волокон (FWM), что позволило выявить различные величины увеличения вязкости по мере уменьшения расстояния между ограничивающими твёрдыми поверхностями. Чтобы устранить это несоответствие, авторы провели моделирование молекулярной динамики, чтобы разобраться в механизмах изменения вязкости в ограниченных жидких УФ-отверждаемых смоляных пленках, используемых в наноимпринтной литографии. Твёрдые поверхности были зафиксированы для поддержания постоянного давления или расстояния, что аналогично условиям SFA и FWM, соответственно. В соответствии с экспериментальными результатами, моделирование подтвердило, что вязкость увеличивается с уменьшением расстояния между твёрдыми поверхностями, причём этот эффект был более выражен в системе с постоянным расстоянием, чем в системе с постоянным давлением. Однако оба типа систем не продемонстрировали явных различий в распределении молекул жидкости. Введя новый концепт скорости изменения свободного объёма, был проведен углублённый анализ молекулярного движения жидкости, который показал более активное движение в системе с постоянным давлением, особенно в центральной области между твёрдыми поверхностями. Это движение положительно коррелировало с атомными колебаниями ограничивающих поверхностей. Полученные результаты подчеркивают, что различные условия ограничения (постоянное давление или постоянное расстояние) существенно изменяют молекулярное движение жидкости и, соответственно, величину вязкости, что подчеркивает необходимость точной характеристики реологических свойств, ограниченных УФ-отверждаемых смол.

С использованием молекулярного моделирования и кинетической теории в работе [44] проведён анализ характеристических кривых Брована для полярных жидкостей. Рассмотрено влияние дипольных взаимодействий и удлинённой формы молекул на их термодинамическое и транспортное поведение. Это исследование проводилось с использованием симметричного двухцентрового класса модельных жидкостей Леннарда-Джонса с плюсовой точкой (2CLJD). Эта модель имеет два параметра (используя приведенные единицы Леннарда-Джонса), а именно- удлинение и дипольный момент. Величины этих параметров изменялись в диапазоне, соответствующем реальным веществам, с применением модели 2CLJD. Было исследовано 43 модельных жидкости. Оказалось, что удлинение молекул значительно сильнее влияет на характеристические кривые, чем дипольный момент. Результаты для жидкости 2CLJD полностью соответствуют постулатам Брауна, первоначально предложенным для простых жидкостей с сферическими молекулами. Сравнение теоретических и компьютерных предсказаний показало их высокое согласие. На основании этого была создана эмпирическая зависимость для характеристической кривой модели 2CLJD, пригодная для моделирования реальных жидкостей. Кроме того, были изучены точки пересечения кривых Шарля и Бойля с бинодалью и спинодалью равновесия пар-жидкость соответственно.

В работе [45] обнаружено, что в жидких углеводородах наблюдается квадратичная зависимость энергии межмолекулярных сил от плотности. Предложена методика оценки константы дисперсионных сил для ароматических соединений. Показано, что для более точного описания зависимости энергии межмолекулярных связей от плотности необходим учет вкладов энергий сил отталкивания и слабых сил притяжения кулоновского вида. По данным об энергии межмолекулярных сил и экспериментов был проведен расчет скорости звука.

Для оценки параметров парноаддитивного двухпараметрического потенциала предлагается простой способ [46], основанный на решении

кубического уравнения, к которому сводится система, определяющая критическое состояние.

В работе [47] построена механическая модель гранулированных сред, пропитанных сжимаемой жидкостью и решена задача определения её динамических характеристик: плотности и упругости. Используя адекватную математическую модель, аналитически вычислены собственные частоты гидроупругой системы и их сдвиги относительно частот невозмущенной системы. Резонансные кривые и величины сдвигов, полученные высокоточными экспериментальными измерениями, позволили определить динамическую плотность и скорость звука с малой погрешностью. Для исследования использованы резонаторы с акустически мягкими стенками, заполненные сжимаемой жидкостью и образцами гранулированных сред. Результаты имеют важное значение для гидроакустики пористых сред, пропитанных жидкостью и подтверждают пригодность модели акустически мягкого резонатора.

В [48] предложено новое малопараметрическое уравнение состояния для термических свойств нормальных веществ, обеспечивающее точное описание газа, жидкости и флюида в широком диапазоне плотностей, начиная с идеального газа и до плотности в тройной точке за исключением критической области. При его применении были рассчитаны калорические свойства и скорость звука для аргона, азота и диоксида углерода без использования дополнительных калорических данных, за исключением энтальпии идеального газа. Результаты расчетов хорошо совпадают с проверенными экспериментальными данными.

В [49] предложено соотношение для расчета скорости ультразвуковых волн (УЗ-волн) в одноатомных и органических жидкостях в рамках кластерной модели вещества. Проведена проверка полученного соотношения на основе экспериментальных данных для сжиженных благородных газов, циклических и линейных углеводородов и воды на линии равновесия жидкость- пар, которая показала, что с погрешностью 1,5% теория способна

прогнозировать поведение скорости УЗ-волн в зависимости от параметров состояния в исследованном классе жидкостей.

Равновесные термодинамические свойства системы частиц, моделирующей простую жидкость, исследованы на основе статистического подхода в [50]. Задача нахождения трёх параметров потенциала взаимодействия сводится к поиску одного безразмерного параметра, оптимальное значение которого найдено с учетом координат критической точки и использовано для расчета свойств в надкритической области и на линии насыщения. Полученные результаты сопоставляются с экспериментальными данными.

В работе [51] было проведено теоретическое исследование распространения звуковых волн в смеси жидкости с полидисперсными парогазовыми пузырьками, учитывая влияние фазовых переходов. На основе разработанного дисперсионного соотношения была получена равновесная скорость звука для данной смеси. Установлено, что повышение концентрации пара в пузырьках ведет к уменьшению фазовой скорости и увеличению коэффициента затухания при частотах, ниже резонансной частоты пузырьков. Процесс эволюции давления в плоских и цилиндрических импульсах также зависит от концентрации пара. Важным результатом стало обнаружение значительного влияния функции распределения пузырьков на характер дисперсионных кривых, что в целом приводит к хорошему согласованию теоретических кривых фазовой скорости с экспериментальными данными.

В работе [52] исследуется задача плоского сдвигового течения жидкости с применением метода SPH (Smooth Particle Hydrodynamics). Рассмотрены колебания плотности SPH-частиц, возникающие при относительном сдвиге слоев жидкости. Выяснено, что использование составного ядра сглаживания приводит к недостаточной точности решения задачи в условиях несжимаемости жидкости. Также показано, что пульсации давления в частицах вызывают пульсации скорости, что необходимо учитывать при численном решении. На основе сопоставления теоретических

и численных результатов разработано выражение для нахождения модельной скорости звука, которое может быть использовано для других задач на движение сплошных сред, решаемых методом SPH.

1.2. Теоретические исследования вязкоупругих и акустических свойств жидкостей

По сей день какой-либо всеобъемлющей теории вязкости жидкостей не существует. Это, вероятно, объясняется тем, что жидкости обладают своеобразными свойствами, которые не могут быть полностью объяснены с использованием характеристик, присущих газам или твердым телам, что создает множество трудностей в моделировании и понимании их поведения. Связано это с тем, что жидкое состояние является промежуточным между газом и твердым телом и его трудно представить с точки зрения различных характеристик свойств веществ.

В теоретических методах расчёта вязкости жидкостей, предложенных Кирквудом и др. [53], а в также молекулярно-динамических подходах, описанных Каммингсом и Эвансом [54], представлены довольно важные результаты, хотя их результаты часто грешат довольно значительными отклонениями от экспериментальных данных.

Жидкое состояния, как среднее между твердым и газообразным, волей-неволей привела к рождению нескольких теорий, основанных на газообразных или твердых структурах. Из них теории функций распределения отдадут предпочтение газообразной концепции жидкостей. Эти теории вводят функцию распределения пар частиц на коротких расстояниях в неупорядоченном состоянии жидкости. Среди различных теорий функции распределения, применяемых для расчёта вязкости, теория Кирквуда и его коллег [53,55,56] была наиболее прогрессивной. Выражение для вязкости жидкости было получено Борном и Грином [57-58] с использованием интеграла Кирквуда-Баффа [53,55,56]. Посредством равновесного свойства в работе [59] Райсом и Кирквудом получено выражение для коэффициента вязкости аргона.

Теории жидкостей с твердотельной структурой основываются на предположении, что молекулы в жидкости локализованы в ограниченных объемах и взаимодействуют лишь с ближайшими соседями. Это приближает поведение жидкости к аморфному твёрдому телу. В работе [60] выделены четыре основные группы таких теорий: дырочные, рассматривающие движение молекул как переходы между пустотами; колебательные, в которых молекулы совершают колебания около равновесных положений; фононные, описывающие распространение звуковых волн в жидкости; релаксационные теории, акцентирующие внимание на временах отклика молекулярных систем на внешние воздействия. Эти подходы позволяют глубже понять микроскопическую природу жидкого состояния вещества и объяснить его физические свойства с позиций твердотельной физики.

Теория скорости реакции Эйринга [2] является наглядным примером применения дырочной теории для описания вязкого течения. В этой теории предполагается, что молекула может двигаться, только если получит достаточную активационную энергию для преодоления потенциального барьера, отделяющего её от соседнего положения. Поэтому течение жидкости уподобляется цепочке активационных переходов. На основе этой теории Гласстоун и другие вывели уравнение для вязкости жидкости, выраженное через молярную свободную энергию активации течения ΔF^* и молярный объем V :

$$\eta = \frac{Nh}{V} e^{\Delta F^*/RT} \quad (1.1)$$

где N , h и R - число Авогадро, постоянная Планка и универсальная газовая постоянная, соответственно. Уравнение (1.1) основано на предположении о ньютоновском течении, что означает постоянство вязкости вне зависимости от приложенной силы или скорости сдвига. Кинкэйд и др. связали ΔF^* с энергией испарения ΔE_{vap} . Построив график зависимости ΔF^* (по уравнению (1.1)) от ΔE_{vap} (по энтальпии испарения ΔH_{vap}) из уравнения

$$\Delta E_{vap} = \Delta H_{vap} - RT_B, \quad (1.2)$$

где T_B - нормальная температура кипения, по данным для 93 органических и неорганических жидкостей Кинкэйд и др. [2] обнаружили линейную

зависимость, проходящую через начало координат с наклоном $(1/2, 45)$. Теория, основанная на уравнении (1.2), превышает экспериментальные значения вязкости в 2–3 раза. Обобщённые данные по энтальпии активации для ряда систем были представлены Хиршфельдером и коллегами [61]. В попытке усовершенствовать модель Эйринга применительно к углеводородам Мор и соавт. [62] показали, что механизм течения изменяется с температурой: при низких температурах преобладают трансляционные перемещения молекул, при промежуточных — колебательные, а при высоких температурах становится заметным свободное вращение молекул вокруг продольных осей. Коллинз [63] предложил оптимальные решения теории Эйринга, использующую температурный коэффициент вязкости при постоянном объеме вместо изобарного температурного коэффициента, применяемого Эвеллом и Эйрингом, для определения активационной энергии. Эта теория была признана количественно согласующейся с экспериментальными данными для вязкостей простых жидкостей.

В работе Маседо и Литовицца [64] теория Эйринга была переработана с учётом вероятности наличия свободного объема, необходимого для движения молекул. Это позволило авторам отдельно оценить влияние активационной энергии и свободного объема на вязкость. Разработанная модель успешно применена к различным жидкостям - от инертных газов, таких как аргон, до структурных жидкостей вроде жидкого SiO_2 - и показала хорошее соответствие с экспериментальными данными по температуре и давлению.

Шахпаронов [65] предложил общую теорию сдвиговой и объемной вязкости ньютоновских жидкостей, включая одно- и многокомпонентные системы, с использованием методов неравновесной термодинамики. Теория позволяет получать простые и наглядные математические зависимости, не включающие эмпирических констант. Она устанавливает связь между вязкостью и различными молекулярными процессами, такими как межмолекулярное взаимодействие, ассоциация молекул, образование комплексов, а также колебания и конформационные изменения молекул. В

[66] обсужден механизм вязкого течения в моноциклических спиртах и объяснены различия в зависимостях вязкости от температуры для углеродного дисульфида, углеродного тетрахлорида, бензола, спиртов и нормальных алканов. Твердообразные и газообразные аспекты поведения жидкости, в которых молекула вибрирует вокруг равновесной решетки, прежде чем перейти в соседнее свободное место, были объединены в теорию значимых структур, предложенную Эйрингом [67]. Вязкость жидкости (η_L), рассматриваемая как сумма вкладов твердообразного и жидкостного поведения, может быть выражена через объемные доли, занятые твердой и жидкой частями по формуле

$$\eta_L = (V_S/V)\eta_S + [1 - (V_S/V)]\eta_G, \quad (1.3)$$

где V_S - объем, занимаемый твердой частью, а V - сумма объемов твердой и газовой частей.

В целом, полутеоретические модели дают удовлетворительные результаты. Во многих теоретических моделях расчеты вязкости сопровождаются значительными отклонениями от экспериментальных данных. В отличие от них, полутеоретические методы представляют собой более точный подход, объединяющий теоретические принципы с эмпирическими зависимостями. Они часто включают одновременно расчет вязкости и определение плотности или объема жидкости, при этом используют, как закон соответствующих состояний, так и статистико-механические модели, включая теорию жестких сфер и различные структурные теории.

Согласно закону соответствующих состояний, если два вещества находятся при одинаковых приведённых условиях (отнесённых к их критическим значениям), их безразмерные свойства, включая вязкость, должны быть одинаковыми. На этой основе методы расчета вязкости используют данные об эталонной жидкости, включая зависимости между вязкостью и плотностью, а также критические параметры рассматриваемого вещества, такие как температура и давление в критической точке, эксцентрический фактор и параметры формы молекул.

Используя межмолекулярный потенциал с квадратной ямой, разработанный в [68], авторы работы [69] вычислили вязкость жидкого аргона. При этом для расчета вязкости жидкости используется уравнение, в котором вязкость рассматривается как функция нескольких параметров – плотности, молекулярной массы, характерного диаметра отталкивания между молекулами, энергии межмолекулярного взаимодействия, отношения диаметров притяжения к отталкиванию, а также значений радиальной функции распределения на расстояниях порядка диаметра отталкивания ($g(\sigma_1)$) и диаметра притяжения ($g(\sigma_2)$) следующим образом:

$$\eta = f(\sigma_2, \varepsilon, R, g(\sigma_1)g(\sigma_2), \rho, M). \quad (1.4)$$

После определения параметров σ_1 , ε и R на основе анализа вириальных коэффициентов и $g(\sigma_1)$ и $g(\sigma_2)$ с использованием уравнения Перкуса-Евика, а также теории возмущений Лоури и др. [70], Дэвис и Лукс [69] рассчитали вязкость аргона с абсолютным средним отклонением 6%. Летсу и Стил [71] связали данные о вязкости для 13 жидкостей, включая углеводороды с общей ошибкой 3% с помощью уравнения

$$\eta = f^0(T_R) + f^1(T_R). \quad (1.5)$$

Фишер [72] разработал уравнение состояния на основе теории Эйринга [67] для различных веществ, включая диоксид урана (UO_2). Он модифицировал функцию разделения твердой фазы, добавив в неё дефектный член, что позволило учитывать отношение кислорода к урану (O/U). Газовая часть модели была откорректирована, чтобы обеспечить соответствие экспериментальным данным при температуре плавления. Гиллан [73] использовал теорию Эйринга для описания термодинамических свойств жидкостей, принимая во внимание их молекулярную структуру. В этом подходе функция разложения жидкости определяется как среднее значение между функциями газа и твёрдого тела с подбором трёх параметров на основе экспериментальных данных. Расчёты дали хорошие результаты для галогенидов щелочных металлов и UO_2 , а метод может быть использован и для описания вязкости жидкостей.

Хеккенбергером и Стефаном в [74] представлено уравнение для транспортных свойств в терминах давления и температуры, так называемые уравнения состояния для транспортных свойств. Это уравнение лишь немного уступает по точности вириальному уравнению состояния для транспортных свойств кислорода. Однако оно гораздо проще и требует всего нескольких параметров. Точности достаточно для практических приложений. Результаты показывают, что кубические уравнения состояния могут описывать транспортные свойства и служат основой для обобщённых методов оценки транспортных свойств жидкостей. На основе полученных результатов в работе [75] предложили уравнение состояния для вязкости, согласно которому поверхность остаточного транспортного свойства (ΔTP) в координатах давление–остаточное транспортное свойство–температура ($P-\Delta TP-T$) обеспечивает более точное представление, чем традиционная термодинамическая поверхность ($P-p-T$). Модель, включающая семь параметров, была откалибрована с использованием регрессии по экспериментальным данным и показала среднее абсолютное отклонение 4,7%. В работе [76] представили выражение параметров модели через углеродные числа для алканов (C_2-C_{20}), где достигли высокой точности (~3%) при описании 19 соединений. При дальнейшем расширении метода на 50 углеводородов с использованием эффективного углеродного числа (ECN) точность повысилась до 2,3%. В основе лежит уравнение Вальтера вида

$$\text{Log}(\text{Log}\eta + 0,8) = b_1 + b_2 \text{Log}T, \quad (1.6)$$

где было подогнано Мехротрой [77] к данным API ("Application Programming Interface" (интерфейс программирования приложений)) Project 42 для 273 тяжелых углеводородов с средним абсолютным отклонением от 0,8% (для нормальных парафинов и олефинов) до 1,4% для не слившихся ароматиков. В этом уравнении b_1 и b_2 - постоянные. Развивая эмпирическое уравнение типа

$$\text{Log}(\text{Log}\eta + 0,8) = 100(0,01T)^b, \quad (1.7)$$

где b эквивалентен константе b_2 уравнения (1.6), оптимальные значения b были регрессированы для каждого соединения. Метод дал диапазон общего

среднего абсолютного отклонения от 2,3% (для разветвленных алканов и олефинов) до 10,6% (для сливающихся колец нафтендов). В работе [78] проведена корреляция вязкости для 89 лёгких и среднетемпературных углеводородов с использованием параметров b_1 и b_2 уравнения Вальтера. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными.

Работа [79] посвящена разработке метода расчета вязкости жидкостей на основе модели Теки–Райса [80]. Уравнение имеет вид

$$\ln(\eta\xi) = \ln(\eta\xi)^{R_1} + [(\omega - \omega^{R_1})/(\omega^{R_2} - \omega^{R_1})][\ln(\eta\xi)^{R_2} - \ln(\eta\xi)^{R_1}], \quad (1.8)$$

где R_1 и R_2 - две выбранные эталонные жидкости, а ξ -определяется выражением

$$\xi = 52,46 \frac{\mu^2 P_c}{T_c^2}.$$

В работе [81] была разработана модель для расчета вязкости, как чистых жидкостей, так и их смесей. Она опирается на абсолютную теорию скорости Эйринга, статистическую термодинамику и концепцию локальных составов. Модель продемонстрировала высокую точность при описании температурной зависимости вязкости для 314 различных веществ, показав среднее относительное стандартное отклонение всего на 1,1%. В анализ были включены углеводороды, спирты, эфиры, ацетаты, амины, альдегиды, кетоны и вода. Дополнительно, Мехротра [82] разработал метод, основанный на уравнении (1.8) с параметром b , определяемым через эквивалентное углеродное число, что позволило достичь средней ошибки 5% при расчете вязкости 70 жидких углеводородов:

$$b = -5,745 - (40.468 / ECN) + 0,616 \ln(ECN).$$

Другие методы, основанные на работе Мехротры [82], это работы Моннери и др. [83], Саудера и Орбея, а также Лея и др. [84]. Авторы работы [83] представили обзор теоретических, полутеоретических и эмпирических методов для разбавленных и плотных газов, жидкостей и смесей. В работе Мехротры [85] были рассмотрены полутеоретические и эмпирические методы, применяемые для предсказания или корреляции вязкости чистых жидких углеводородов, нефтяных фракций и их смесей.

Автор работы [86] представил некоторые эмпирические методы, которые были предложены и протестированы различными исследователями для нескольких типов жидкостей. Включенные модели содержат уравнения с двумя, тремя и большим числом постоянных, учитывающих такие параметры, как температура, давление, молекулярная масса и другие факторы.

В работе [87] рассмотрены упругие свойства жидкостей, исследованные с использованием метода коррелятивных функций распределения, который позволяет оценить взаимосвязь между молекулярными взаимодействиями в жидкостях. В [88] исследованы сдвиговые и объемные модули упругости жидкостей и показано, что их поведение зависит от скорости деформации. При медленных процессах жидкость проявляет только объемную упругость, а при быстрых — как сдвиговую, так и объемную. Модули упругости связаны с межмолекулярным потенциалом и молекулярными параметрами жидкости. Вязкоупругие свойства жидкостей имеют ключевое значение для понимания их поведения в различных химических и физических процессах.

Межмолекулярные взаимодействия определяют множество явлений в конденсированных фазах, поэтому обсуждение равновесных и динамических характеристик молекул в любых фазах невозможно без учета потенциальных функций взаимодействия частиц (атомов и молекул). В работе [89] приведен обзор многочисленных исследований, в которых данный вопрос стал предметом изучения.

В [90] для изучения структуры и свойств жидкой воды предложено применение методов молекулярной динамики, Монте-Карло и интегральных уравнений. Рассмотрены и анализированы новые и наиболее достоверные результаты, полученные методами компьютерного моделирования, касающиеся свойств воды на молекулярном и надмолекулярном уровнях в широком диапазоне давлений и температур.

Метод временных корреляционных функций, описанный Р. Кубо [91, 92], является важным инструментом для исследования явлений переноса и

упругих свойств жидкостей. Он применяется для неравновесных процессов и позволяет вычислять коэффициенты переноса через интегралы по времени от временных корреляционных функций потоков. Для эффективного применения этого метода были разработаны дополнительные методы, включая проекционные операторы и неравновесный статистический оператор [93-95]. На их основе были проведены детальные исследования явлений переноса и упругих свойств жидкостей [96-99].

В [100] рассматривается фотопроект с участием избыточных электронов в рамках дискретной модели полярных жидкостей. Обсуждены проблемы, связанные с недостаточной информацией о нестационарных состояниях атомов и молекул с избыточными электронами, что может помочь в объяснении электропроводности в металлах и неупорядоченных средах.

В серии работ [101-105] для описания термодинамических свойств полярных жидкостей была предложена модель заторможенного вращения молекул. В случае дипольных жидкостей основным структурным элементом в этой модели является бесконечный “ориентационный кластер” статистическая цепочка связанных друг с другом дипольными силами полярных молекул, находящихся в наиболее выгодной конфигурации “голова к хвосту”. Частицы фиксированы в своих положениях равновесия – в цепочке они могут совершать лишь заторможенные вращения (либрации) вблизи минимума потенциала. Помимо бесконечной цепочки имеется также небольшое число свободно вращающихся частиц и конечных кластеров, не принадлежащих в данный момент цепочке. Под влиянием тепловых флуктуаций частицы в цепочке могут преодолевать барьеры вращения, что приводит к разориентации моментов соседних частиц и разрыву цепи, однако, благодаря наличию свободных частиц она тут же образуется вновь, так что конфигурация (траектория) цепочки постоянно меняется, проходя всякий раз по совершенно другим частицам жидкости. Таким образом, в модель заторможенного вращения молекул вращательная динамика молекул жидкости моделируется конформационной динамикой макромолекулы, а

сама модель, в которой вместо вращений отдельных частиц рассматривается динамика макроскопического объекта (цепочки), вполне аналогична гармонической модели твердого тела, в которой колебательная динамика частиц эквивалентна динамике нормальных колебаний – макроскопических пространственных объектов (волн), образованных этими частицами.

В [106] метод неравновесной функции распределения (НФР) [95] был обобщен для описания динамических неравновесных свойств жидкостей с произвольными формами молекул. На основе замкнутой системы уравнений обобщённой (релаксационной) гидродинамики в работе [107] исследованы динамические вязкоупругие свойства многоатомных полярных жидкостей. Получены аналитические выражения и проведён анализ физических механизмов внутренних релаксационных процессов. Показано, что для многоатомных жидкостей определяющую роль играют обменные между вращательными и поступательными степенями свободы молекул релаксационные процессы. Проведён численный расчёт зависимости динамических вязкоупругих параметров воды от температуры, плотности и частоты. Работа [108] посвящена исследованию динамических вязкоупругих свойств многоатомных полярных жидкостей в рамках обобщенной гидродинамики. В этой работе подчеркивается важность обмена между вращательными и поступательными степенями свободы молекул. Для воды рассчитаны зависимости коэффициентов вязкости и модулей упругости от температуры, плотности и частоты.

В соответствии с вышеизложенными теориями, сдвиговая упругость в жидкостях должна возникать только при высоких, мегагерцовых частотах. Но авторы работы [109] впервые зарегистрировали её проявление при значительно более низкой частоте (100 кГц) у всех исследованных жидкостей с различными вязкостью и полярностью. Это позволило выдвинуть гипотезу о наличии в жидкостях низкочастотного вязкоупругого релаксационного процесса. Возможно, что при низкочастотном сдвиговом воздействии на прослойку жидкости происходят динамические перемещения больших групп молекул. Авторы указывают, что дальнейшие всесторонние исследования

низкочастотной сдвиговой упругости разными методами имеют фундаментальное значение для физики жидкостей. В резонансном методе для сдвигового воздействия на исследуемую прослойку жидкости при малых частотах используется пьезокварцевый кристалл прямоугольной формы. На горизонтальную грань пьезокварца наносится прослойка жидкости, накрытая накладкой. При колебании пьезокварца на резонансной частоте прослойка жидкости испытывает динамические сдвиговые деформации и в ней возбуждается сдвиговая поперечная волна. В работе рассматривается общее решение задачи взаимодействия колебательной системы пьезокварц — прослойка жидкости — накладка, а по параметрам сдвиговой волны рассчитываются значения действительного модуля сдвига и угол механических потерь.

Уникальное явление сверхтекучести гелия при температурах, близких к абсолютному нулю, было объяснено фононными возбуждениями по Ландау [110]. Ландау, используя квантовые операторы плотности и скорости, предсказал явление второго звука, экспериментально подтверждённое Пешковым в 1944 году. Для расчёта вязкости гелия при низких температурах Ландау и Халатников [110] применили кинетическую теорию к фононным и ротонным возбуждениям, рассматриваемым как квазичастицы идеального газа. Теория Ландау-Халатникова (Л-К) объясняет отрицательный температурный коэффициент вязкости гелия ниже 1,6 К сильной температурной зависимостью фонон-фононного рассеяния [60].

В работе [111] продолжена количественная идентификация жидкости как вещества, состоящего из кластеров - микрочастиц, образующихся при «слипании» молекул пара. Показана специфика учета колебаний кластеров при распространении звука. Проанализированы опыты Пешкова и Андроникашвили. Показано, что второй звук - это тепловые колебания кластеров. Обоснована роль размеров кластеров в опытах Андроникашвили.

В рамках феноменологического подхода в работе [112] получены уравнения гидродинамики нормальной и сверхтекучей жидкостей, обладающих спонтанной электрической поляризацией. Показано, что

распространение звуковых волн в средах со спонтанной поляризацией сопровождается колебаниями электрического поля. Вычислены поправки к скоростям первого и второго звуков в нормальной и сверхтекучей жидкостях.

Обобщённые результаты исследований структуры, релаксационных процессов и акустических свойств жидкостей, выполненные с использованием современных теоретических и акустических методов, приведены в работах [113–115].

В работе [116] получено выражение для скорости звука через радиальную функцию распределения и ее производную по температуре. Так как из экспериментальных данных могут быть независимо определены радиальная функция распределения и скорость звука, то найденная связь позволяет проанализировать особенности фазовой диаграммы вещества и термодинамическую согласованность уравнений состояния.

Для модели жидкого кристалла в виде длинных стержней в работе [117] получена кинетическая связь между деформацией сдвига и параметром порядка S , возникающая при быстром деформировании среды. Показано, что учет этой связи в уравнении для S и тензоре напряжений приводит к анизотропии упругого модуля в звуковой волне, определены критические, обусловленные релаксацией S , анизотропии коэффициента поглощения и скорости звука. Результаты расчета удовлетворительно согласуются с данными эксперимента.

В работе [118] приводится анализ теоретических подходов к изучению акустических спектров скорости и поглощения звука в диапазоне частот до 10 ГГц в жидких системах. На примере оксиэтилированных производных нормального децилового спирта, принадлежащих к неионогенным поверхностноактивным веществам (ПАВ) показано, что при комнатной температуре и низких степенях оксиэтилирования акустические спектры можно описать в рамках релаксационной теории.

В работе [119] исследовано распространение звука в жидкостной смеси с пузырьками, покрытыми вязкоупругой оболочкой. Получено

дисперсионное соотношение, найдены асимптотики фазовой скорости и затухания, установлена зависимость скорости звука от частоты и размера пузырьков. Теоретические результаты сопоставлены с экспериментом.

На основе уравнения состояния воды и пара в работе [120] изучены характеристики распространения и отражения ударных волн в парогазожидкостных средах. Определено влияние давления и газосодержания на скорость звука, получены параметры ударных волн при различных режимах сжатия. Результаты сопоставлены с экспериментальными данными.

В работе [121] исследуется влияние параметров среды на векторно-фазовые свойства акустического поля, используя предложенное авторами волновое уравнение для колебательной скорости и уравнение для акустического давления. Получены аналитические выражения для различных акустических величин, которые связывают их с плотностью среды и скоростью звука. Это позволяет решать обратную задачу для определения распределения плотности и скорости звука в среде.

В рамках уравнений Нойрингера--Розенцвейга для намагничивающихся жидкостей в [122] получены решения, описывающие поперечные линейно-поляризованные и продольные плоскополяризованные магнитозвуковые волны при произвольной ориентации волнового вектора и вектора намагниченности жидкости. В общем случае вектор групповой скорости магнитозвуковых волн имеет составляющую, ортогональную волновому вектору. Для полученных решений скорость звука уменьшается от максимального значения при распространении волны вдоль вектора намагниченности до минимального значения при распространении волны перпендикулярно вектору намагниченности. Получены точные решения уравнений для намагничивающихся жидкостей в виде волн Римана, которые переходят в рассмотренные магнитозвуковые волны при малых возмущениях параметров жидкости и магнитного поля.

В [123] рассмотрена задача о распространении акустической волны в жидкости с пузырьками газа, покрытыми вязкоупругой оболочкой. Найдена зависимость волнового числа от частоты возмущений. Получены

низкочастотные асимптотики фазовой скорости и коэффициента затухания. Установлена и проиллюстрирована зависимость равновесной скорости звука от частоты возмущений и размера покрытых пузырьков. Проведено сравнение теории с известными экспериментальными данными.

В [124] рассмотрено одномерное стационарное течение жидкости с газовыми пузырьками при следующих предположениях: смесь монодисперсная; вязкость и теплопроводность существенны лишь в процессе межфазного взаимодействия и при пульсациях пузырьков. Полагалось, что массообмен между фазами отсутствует, а температура жидкости постоянна, в отличие от температуры газа в пузырьке. Давление в пузырьке бралось однородным, что обеспечивается, если радиальная скорость стенок пузырька значительно меньше скорости звука в газе. Для поведения газа в пузырьках был принят политропический закон. На основе одномерных стационарных уравнений течения жидкости с газовыми пузырьками выписано волновое уравнение для пузырьковой жидкости в переменных Лагранжа. Для случая сильновязких жидкостей получено решение вида «ступенька».

В работе [125] выведено модифицированное уравнение Релея–Ламба, учитывающее радиальные колебания пузырька газа, покрытого вязкоупругой оболочкой, на внутренней поверхности которой распределен тонкий слой жидкости. В работе найдено дисперсионное уравнение для случая малых возмущений, учитывающее теплообмен между фазами газ-жидкость. Получены аналитические зависимости равновесной скорости звука от размеров жидкого слоя и оболочки, а также от частоты возмущений. Проанализировано влияние параметров материала на фазовую скорость и коэффициент затухания. Дано сравнение теории с экспериментальными данными.

В работе [126] для модели двухкомпонентной магнитной жидкости с замороженной намагниченностью с использованием уравнения движения и микроскопического выражения тензора напряжения, выведенных на основе метода неравновесной статистической теории, получены дисперсионные уравнения, описывающие сдвиговые моды, а также быстрые, медленные и

альфвеновские магнитогидродинамические волны в магнитных жидкостях. Проведены численные расчеты зависимости скорости быстрой звуковой волны от частоты и величины внешнего магнитного поля.

В работах [127–136] на основе молекулярно-кинетической теории получены аналитические выражения для коэффициентов сдвиговой и объемной вязкости, а также модулей сдвиговой и объёмной упругостями, скорости звука и коэффициента поглощения для простых и магнитных жидкостей, а также растворов электролитов. Численные расчёты с учётом моделей взаимодействия частиц и радиальной функции распределения продемонстрировали хорошее согласие с экспериментом.

Вышеприведенные исследования показывают, что динамические вязкоупругие свойства жидкостей, в первую очередь, можно адекватно описать только с учетом молекулярной структуры, а во втором- с учётом механизмов внутренних релаксационных процессов в них. В отличие от простых моделей жидкостей, которые могут учитывать только усредненные характеристики, строгие статистические теории жидкостей позволяют учитывать сложные взаимодействия между молекулами, а также влияние различных факторов, таких как размерные эффекты, ориентация молекул и наличие дисперсных фаз. Исследование полярных жидкостей и их свойств требует всестороннего подхода. При этом в первую очередь надо учитывать молекулярную структуру жидкостей и внутренние релаксационные процессы, происходящие в них. Поэтому систематическое рассмотрение и подробный анализ механизмов релаксационных процессов, а также определение их вклада в динамические характеристики полярных жидкостей на основе статистической теории являются критически важными.

Заключение к главе 1

Из краткого обзора видно, что вопросы, связанные с вязкоупругими и акустическими свойствами жидкостей, занимают важное место в научных исследованиях, что свидетельствует о глубоком интересе к этим темам и необходимости дальнейших разработок. Однако, несмотря на значительное

количество исследований, динамика процессов, происходящих в жидкостях, остается недостаточно изученной. В проанализированных работах не уделяется должного внимания систематическому учету релаксационных процессов, включая структурную релаксацию. В связи с вышеизложенным, особую научно-практическую ценность представляет всестороннее исследование динамических вязкоупругих и акустических свойств жидкостей в широком диапазоне термодинамических параметров и частот. Важным элементом работы является изучение природы внутренних релаксационных процессов, численное моделирование, а также сопоставление теоретических результатов с экспериментальными данными. Эти задачи составляют основную цель данной диссертационной работы.

ГЛАВА II. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЯЗКОУПРУГИХ СВОЙСТВ ЖИДКОСТЕЙ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ С УЧЁТОМ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

2.1. Обобщенное кинетическое уравнение для одночастичной функции распределения

Для описания неравновесных состояний жидкостей предлагается кинетический подход, позволяющий вывести уравнения обобщённой гидродинамики. В этом методе потоки массы, импульса и тепла рассчитываются с помощью одно- и двухчастичных функций распределения, что даёт возможность определить кинетическую и потенциальную части релаксирующих потоков. Эволюция функций распределения взаимодействующих частиц удовлетворительно описывается системой уравнений Боголюбова [137], однако этот тип уравнений не охватывает необратимость макроскопических и релаксационных процессов. Разработка кинетического уравнения для жидкостей с использованием этих уравнений важна для понимания процессов в плотных средах, хотя метод выделения малого параметра по плотности оказывается неэффективным для жидкостей с коллективными взаимодействиями [138]. Поэтому, согласно работе [138], построение кинетических уравнений для плотных газов и жидкостей возможно лишь при условии пренебрежения полной временной корреляцией начального состояния, которая существенно меньше характерного времени парных столкновений. Автором получены кинетические уравнения для неидеальных газов и плазмы с учётом вклада парных, тройных и более сложных столкновений.

В работе [139] представлен расширенный вариант уравнения Больцмана–Энскога за счёт включения в левую часть интеграла Власова, который описывает парные взаимодействия через потенциальную функцию $\Phi(|\vec{q}_1 - \vec{q}_2|)$ с учётом жёстких столкновений сферических частиц. Найдены микроскопические решения, соответствующие точной траектории движения частиц в данной динамической системе.

Всесторонний анализ и методы получения обобщённых квантовых кинетических уравнений рассмотрены в [140] (Ван Ховом, Пригожиным, Яннером, Браутом и др.). Также в различных приближениях проанализирован переход к классическим уравнениям.

Работа [140] содержит подробный анализ и методы вывода обобщённых (включая квантовые) кинетических уравнений, предложенных Ван Ховом, Пригожиным, Яннером, Браутом и другими, а также рассматривает переход к классическим уравнениям в различных приближениях. В [141] рассматривается значимость многочастичных взаимодействий в столкновительных интегралах, а также пространственно-плотностных и скоростных корреляций в рамках кинетического описания.

На основе метода Ю.Л.Климонтовича в работе [127] получены кинетические уравнения для $f_1(\vec{x}_1, t)$ и $f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$. Полученные уравнения описывают необратимые процессы в жидкостях. Усреднение цепочки уравнений Боголюбова проводится на временном интервале, существенно меньшем времени парных столкновений. Цепочка уравнений, выведенная для сглаженных $f_1(\vec{x}_1, t)$ и $f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$, в которых диссипативные эффекты обусловлены парными столкновениями, включает интегральные члены, отражающие влияние крупномасштабных флуктуаций на релаксационные процессы. Уравнения, представленные в [127], по своей структуре аналогичны цепочке уравнений Боголюбова, построенной для гладких функций распределения. Добавление столкновительных членов типа Фоккера–Планка к динамическому члену Боголюбова, отвечающему за коллективное взаимодействие, является единственным отличием и обеспечивает необратимость эволюции во времени.

В [127] описана статистическая система, включающая N частиц массой m , взаимодействующих через сферически симметричный потенциал $\Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)$. С использованием кинетических уравнений для одно- и двухчастичных функций распределения $f_1(\vec{x}_1, t)$ и $f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$ были предложены следующие уравнения:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial f_1(\vec{x}_1, t)}{\partial t} + \frac{p_i^\alpha}{m} \frac{\partial f_1(x_1, t)}{\partial q_1^\alpha} \\
& - \int \frac{\partial \Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)}{\partial q_1^\alpha} \frac{\partial f_2(x_1, x_2, t)}{\partial p_1^\alpha} \\
& + \frac{\partial \Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)}{\partial q_j^\alpha} \frac{\partial f_2(x_1, x_2, t)}{\partial p_j^\alpha} dx_2 = \\
& = \beta \frac{\partial}{\partial p_1^\alpha} \left(\frac{\tilde{p}_1^\alpha}{m} f_1(x_1, t) + k_B T(q_1, t) \frac{\partial f_1(\vec{x}_1, t)}{\partial p_1^\alpha} \right),
\end{aligned} \tag{2.1}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)}{\partial t} \\
& + \sum_{i=1}^2 \frac{p_i^\alpha}{m} \frac{\partial f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)}{\partial q_i^\alpha} - \left(\frac{\partial \Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)}{\partial q_1^\alpha} \frac{\partial f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)}{\partial p_1^\alpha} \right. \\
& + \left. \frac{\partial \Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)}{\partial q_j^\alpha} \frac{\partial f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)}{\partial p_j^\alpha} \right) \\
& - \int \frac{\partial \Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)}{\partial q_1^\alpha} \frac{\partial f_3(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, t)}{\partial p_1^\alpha} \\
& + \frac{\partial \Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)}{\partial q_j^\alpha} \frac{\partial f_3(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, t)}{\partial p_j^\alpha} dx_3 \\
& = \sum_{i=1}^2 \beta \frac{\partial}{\partial p_i^\alpha} \left(\frac{\tilde{p}_i^\alpha}{m} f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) + k_B T(q_i, t) \frac{\partial f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)}{\partial p_i^\alpha} \right) \\
& + \sum_{i=1}^2 \beta^* \frac{\partial}{\partial p_i^\alpha} \left(\frac{\tilde{p}_i^\alpha}{m} + k_B T(q_i, t) \frac{\partial f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)}{\partial p_i^\alpha} \right) f_1(\vec{x}_1, t) f_2(\vec{x}_2, t),
\end{aligned} \tag{2.2}$$

где $\beta = (2\pi m k T)^{-\frac{3}{2}} \frac{m \rho}{3} \int_0^\infty \Phi(k) k^3 dk$ и $\beta^* = \beta [g(|\vec{r}_{12}|) - 1]$ -коэффициент трения, $\rho = mn$ – плотность, $\vec{x} = (\vec{q}, \vec{p})$, k_B – постоянная Больцмана, $g(|\vec{r}_{12}|)$ – радиальная функция распределения, k – волновой вектор, $\Phi(k)$ – Фурье-преобразование потенциала $\Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)$, а $f_1(x_1, t)$ и $f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$ – усредненные функции распределения за время, меньшее времени парного столкновения. Эти функции медленно меняются. Интегралы в левых частях

(2.1) и (2.2) показывают влияние коллективных взаимодействий на процессы релаксации. Уравнения (2.1) и (2.2) являются неполными, поскольку в системе множества взаимодействующих частиц полное изолирование групп невозможно, что делает необходимым использование приближённой модели. При этом для трехчастичной функции распределения $f_3(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, t)$ мы используем приближение суперпозиции Кирквуда, который через двухчастичную функцию распределения $f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$ задается в виде

$$f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) = n_2(\vec{q}_1, \vec{q}_2, t) (2\pi m k_B T(q_1, t))^{-\frac{3}{2}} \times \\ \times (2\pi m k_B T(q_2, t))^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\sum_{i=1}^2 \frac{(p_i^\alpha - m\vartheta_{2(i)}^\alpha)^2}{2\pi m k_B T(q_i, t)}\right). \quad (2.3)$$

Здесь $n_2(\vec{q}_1, \vec{q}_2, t)$ и $\vartheta_{2(i)}^\alpha(\vec{q}_1, \vec{q}_2, t)$ - импульсные моменты нулевой и первого порядка двухчастичной функции распределения $f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$:

$$n_2(\vec{q}_1, \vec{q}_2, t) = f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) d\vec{p}_1 d\vec{p}_2, \\ n_2(\vec{q}_1, \vec{q}_2, t) \vartheta_{2(i)}^\alpha(\vec{q}_1, \vec{q}_2, t) = j_{2(i)}^\alpha(\vec{q}_1, \vec{q}_2, t) = \\ = \int \frac{p_i^\alpha}{m} f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t) d\vec{p}_1 d\vec{p}_2. \quad (2.4)$$

Следует отметить, что $f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$ в форме (2.3) содержит вклады, как пространственной корреляции $n_2(\vec{q}_1, \vec{q}_2, t)$, так и корреляции скоростей $j_{2(i)}^\alpha(1,2) = j_{2(i)}^\alpha(\vec{q}_1, \vec{q}_2, t)$ в конфигурационное пространство пары частиц.

Учитывая (2.3), в (2.1), переходим от координат \vec{q}_1, \vec{q}_2 к обратным и средним координатам $\vec{r}_{12} = \vec{q}_2 - \vec{q}_1$ и $\vec{R} = (\vec{q}_2 + \vec{q}_1)/2$, затем разлагая подынтегральные функции $n_2(\vec{R}, \vec{r}_{12}, t)$, $j_{2(i)}^\alpha(\vec{R}, \vec{r}_{12}, t)$ в ряд Тейлора вблизи \vec{q}_1 , для $f_1(\vec{x}_1, t)$ получаем следующее линеаризованное кинетическое уравнение:

$$\frac{\partial f_1(\vec{x}_1, t)}{\partial t} + \frac{p_i^\alpha}{m} \frac{\partial f_1(\vec{x}_1, t)}{\partial q_1^\alpha} + F^\alpha(\vec{q}_1, t) \frac{\partial f(p_1)}{\partial p_1^\alpha} \\ + D^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t) \frac{\partial}{\partial p_1^\alpha} \left(\frac{p_i^\alpha}{m} f(p_1) \right) = I_{st}[f(p_1); f(\vec{x}_1, t)], \quad (2.5)$$

где

$$F^\alpha(\vec{q}_1, t) = \frac{1}{n} \int \frac{\partial \Phi(|\vec{r}_{12}|)}{\partial r_{12}^\alpha} n_2(\vec{q}_1, \vec{r}_{12}, t) d\vec{r}_{12} \quad (2.6)$$

есть усредненная сила, действующая на частицу в точке \vec{q}_1 со стороны других окружающих частиц пространственной корреляции, а $D^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t)$ определяется неравновесным бинарным потоком частиц $J_2^\alpha(\vec{q}_1, \vec{r}_{12}, t)$ в конфигурационном пространстве следующим образом:

$$D^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t) = \frac{\sigma^3}{2nk_B T} \frac{\partial}{\partial q_1^\gamma} \frac{1}{4} \int \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{r^\alpha r^\beta}{r} J_2^\alpha(\vec{q}_1, r, t) d\vec{r}, \quad (2.7)$$

где

$$J_2^\alpha(\vec{q}_1, r, t) = J_{2(1)}^\alpha(\vec{q}_1, r, t) + J_{2(2)}^\alpha(\vec{q}_1, r, t)$$

неравновесный бинарный поток, $\vec{r} = \vec{r}_{12} / \sigma$ -диаметр молекулы жидкости, а

$$I_{st}[f(p_1); f(\vec{x}_1, t)] = \beta \frac{\partial}{\partial p_i^\alpha} \left(\frac{\tilde{p}_i^\alpha}{m} f_1(\vec{x}_1, t) + k_B T(q_i, t) \frac{\partial f_1(\vec{x}_1, t)}{\partial p_1^\alpha} \right)$$

линеаризованный член столкновения Фоккера-Планка, T и $T(q_i, t)$ - равновесная и возмущенная температуры, соответственно.

Обобщённое кинетическое уравнение (2.5) для одночастичной функции распределения содержит не только релаксационные члены для $f_1(\vec{x}_1, t)$, но и компоненты в импульсном пространстве, определяющие эволюцию бинарной плотности $n_2(\vec{q}_1, \vec{r}_{12}, t)$ и бинарного потока $J_2^\alpha(\vec{q}_1, r, t)$ в конфигурационном пространстве, что позволяет учитывать структурную релаксацию. Общее решение уравнения (2.5) позволяет определить функциональные временные зависимости корреляционных функций высшего порядка $f_s(s > 2)$ с помощью $f_1(\vec{x}_1, t)$.

На основе (2.5) можно исследовать вязкоупругие и термоупругие свойства, а также спектры коллективных колебаний в классических жидкостях. Следует отметить, что если ограничиться первыми тремя членами в левой части уравнения (2.5) и решить уравнения для $n_2(\vec{q}_1, \vec{r}_{12}, t)$ в случае медленных процессов ($\omega\tau \ll 1$), то результаты для явлений переноса в простых жидкостях совпадут с результатами работы [142].

Теперь выведем уравнения для $n_2(\vec{q}_1, \vec{r}_{12}, t)$ и $J_2^\alpha(\vec{q}_1, r, t)$ в конфигурационном пространстве. Экспериментальные данные о структуре жидкости

указывают на то, что помимо одночастичного движения в системе наблюдается коллективная динамика, возникающая вследствие межмолекулярных взаимодействий. При равновесном состоянии молекулярная структура жидкости определяется с помощью радиальной функции распределения $g(|\vec{r}_{12}|)$. Характер теплового движения и неравновесная структура жидкостей описываются посредством неравновесных функций $n_2(\vec{q}_1, \vec{r}_{12}, t)$ и $J_2^\alpha(\vec{q}_1, r, t)$, которые содержатся в уравнении (2.5).

В качестве исходного уравнения возьмем (2.2). Умножая каждый член этого уравнения на 1 и $\frac{p_i^\alpha}{m}$ и интегрируя по импульсам \vec{p}_1 , и \vec{p}_2 , получаем дифференциальные уравнения для нулевого и первого момента f_2 . Находим нулевой момент и получаем уравнение непрерывности в пространстве пар частиц, которое содержит дивергенцию бинарных потоков частиц $j_{2(i)}^\alpha(\vec{q}_1, r, t)$. Первый момент дает уравнение для $j_{2(i)}^\alpha$, которое содержит $K_{2(ij)}^{\alpha\beta}$, бинарный импульсный поток частиц и т. д. Следовательно, уравнения для моментов образуют цепочку сопряженных уравнений. Принимая во внимание наивысшие моменты медленно меняющейся функции $f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$ в пространстве и времени, последовательно решая данные уравнения в первом приближении относительно m/β и согласовывая решения с уравнениями для нулевого и первого моментов, с учётом слабой пространственной неоднородности приходим к следующему результату:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t)}{\partial t} + \omega_0 \hat{L} n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t) &= F(\vec{q}_1, \vec{r}, t), \\ \frac{\partial J_2^\alpha(\vec{q}_1, r, t)}{\partial t} + \omega_1 \hat{L} J_2^\alpha(\vec{q}_1, r, t) + \omega_0 \hat{L} J_2^\alpha(\vec{q}_1, r, t) &= Q^\alpha(\vec{q}_1, \vec{r}, t), \end{aligned} \quad (2.8)$$

где

$$\omega_0 = \tau_0^{-1} = 2kT/\beta\sigma^2, \quad \omega_1 = \beta/m, \quad \omega_2 = \omega_0/2,$$

$$\hat{L} = -\frac{\partial}{\partial r^\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial r^\alpha} - \frac{\partial}{\partial r^\alpha} \ln n_2^0(|r|) \right),$$

$$\begin{aligned}
F(\vec{q}_1, \vec{r}, t) = & -2n_2^0(|r|) \left\{ 1 + \frac{r}{6} \frac{\partial \ln n_2^0(|r|)}{\partial r} - \frac{1}{2} \left[n \left(\frac{\partial \ln n_2^0(|r|)}{\partial n} \right)_T \right. \right. \\
& \left. \left. + \gamma T \left(\frac{\partial \ln n_2^0(|r|)}{\partial T} \right)_n \right] \operatorname{div} \vartheta \right. \\
& \left. - \frac{1}{r} \left(r^\alpha r^\beta - \frac{1}{3} r^2 \delta^{\alpha\beta} \right) \frac{\partial \ln n_2^0(|r|)}{\partial r} \left\{ \frac{\partial \vartheta^\alpha}{\partial q_1^\beta} \right\} \right\},
\end{aligned} \tag{2.9}$$

$$Q^\alpha(\vec{q}_1, \vec{r}, t) = \omega_1 \hat{J}_2^\alpha(\vec{q}_1, \vec{r}, t),$$

$$\begin{aligned}
\hat{J}_2^\alpha(\vec{q}_1, \vec{r}, t) = & \frac{k_B T}{\beta} n^2 g(r) \frac{r^\alpha r^\beta}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \ln g(r)}{\partial T} \right)_P \frac{\partial T(1)}{\partial q_1^\beta} \\
& - \frac{k_B T}{\beta} n^2 g(r) \left(\frac{\partial \ln g(r)}{\partial T} \right)_P \frac{\partial T(1)}{\partial q_1^\alpha},
\end{aligned}$$

$$\left(\frac{\partial g(r)}{\partial T} \right)_P = \left(\frac{\partial g(r)}{\partial n} \right) \left(\frac{\partial n}{\partial T} \right)_P + \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_n,$$

$$\gamma = \frac{1}{nC_V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_n, \quad \left\{ \frac{\partial \vartheta^\alpha}{\partial q_1^\beta} \right\} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \vartheta^\alpha}{\partial q_1^\beta} + \frac{\partial \vartheta^\beta}{\partial q_1^\alpha} - \frac{1}{3} \delta^{\alpha\beta} \operatorname{div} \vartheta \right),$$

где C_V - теплоемкость жидкости при постоянном объеме, $n_2^0(|r|) = n^2 g(r)$ -равновесная плотность.

Система уравнений (2.8) является обобщенными уравнениями Смолуховского для $n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t)$ и $J_2^\alpha(\vec{q}_1, r, t)$.

Решение первого уравнения системы (2.8), следуя [127], представляет собой задачу Коши ($t > 0$, $-\infty \leq r \leq \infty$) с нулевым начальным условием, которое имеет вид

$$n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t) = \int_0^t dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} G(r, r_1, t - t_1) F(\vec{q}_1, \vec{r}_1, t) d\vec{r}_1, \tag{2.10}$$

где

$$G(r, r_1, t - t_1) = \frac{2(rr_1)^{-1}}{(2\pi)^3} \left(\frac{\pi}{\omega_0(t - t_1)} \right)^{1/2} \left[e^{-\frac{(r-r_1)^2}{4\omega_0(t-t_1)}} - e^{-\frac{(r+r_1)^2}{4\omega_0(t-t_1)}} \right], \tag{2.11}$$

Выражения (2.10), является фундаментальным решением уравнения Смолуховского (2.8) для $n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t)$ и описывает пространственно-временное поведение бинарной плотности в конфигурационном пространстве. В

следующих параграфах для исследования вязкоупругих свойства жидкостей воспользуемся выражением (2.10) с учетом (2.11).

2.2. Уравнения обобщенной гидродинамики и вязкоупругие свойства классических жидкостей

Для описания неравновесного состояния жидкости применяются обобщённые уравнения гидродинамики, которые выводятся с помощью методов статистической физики и основаны на законах сохранения массы, импульса и энергии. Существенное отличие этих уравнений заключается в том, что коэффициенты переноса определяются из микроскопических соображений, т.е. коэффициенты могут зависеть от масштаба и времени действия градиентов гидродинамических величин и характеризуют линейный отклик жидкости на внешние воздействия, включая термическую и структурную релаксации. Феноменологическая форма этих уравнений представлена в [143]. Для получения обобщённой системы уравнений применяется метод кинетических уравнений. Линеаризованные законы сохранения для жидкостей получаются из уравнения (2.5) методом моментов:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \operatorname{div} \vec{\vartheta} &= 0, \\ \rho \frac{\partial \vartheta^\alpha}{\partial t} + \frac{\partial P^{\alpha\beta}}{\partial q_1^\beta} &= 0, \\ \rho C_V \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial S^\alpha}{\partial q_1^\alpha} + T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \operatorname{div} \vec{\vartheta} &= 0.\end{aligned}\tag{2.12}$$

Здесь ρ - плотность массы, $\rho \vartheta^\alpha = m \int \frac{\vec{p}_i^\alpha}{m} f_1(\vec{x}_1, t) d\vec{p}$ - средняя скорость, $P^{\alpha\beta}$ и S^α - соответственно поток тензора импульса и вектор потока тепла, которые определяются следующим образом:

$$\begin{aligned}P^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t) &= P_k + K^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t) - \frac{\sigma^3}{2} \int \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{r^\alpha r^\beta}{r} n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t) d\vec{r} \\ S^\alpha &= S_k^\alpha(\vec{q}_1, t) + \frac{\sigma^3}{4} \int \left(\Phi(r) \delta^{\alpha\beta} - \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{r^\alpha r^\beta}{r} \right) J_2^\alpha(\vec{q}_1, \vec{r}, t) d\vec{r}.\end{aligned}\tag{2.13}$$

Уравнения для кинетической части давления $P_k = nk_B T = \frac{1}{3} \int \frac{\vec{p}_i^\alpha}{m} f_1(\vec{x}_1, t) d\vec{p}$, для вязкого тензора $K^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t) = \int \frac{\vec{p}_1^\alpha \vec{p}_1^\beta}{m} f_1(\vec{x}_1, t) d\vec{p}$ и теплового потока $S_k^\alpha(\vec{q}_1, t) = \frac{1}{2} \int \frac{\vec{p}_1^\alpha \vec{p}_1^\beta \vec{p}_1^\gamma}{m^2} f_1(\vec{x}_1, t) d\vec{p}$, которые могут быть получены из (2.5), имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_k}{\partial t} + \frac{5}{3} P_k \operatorname{div} \vec{\vartheta} + \frac{2}{3} K^{\alpha\beta} \frac{\partial \vartheta^\alpha}{\partial q_1^\beta} + \frac{2}{3} \operatorname{div} \vec{S}_k \\ - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial q_1^\gamma} \left[\frac{1}{4} \int \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{r^\alpha r^\beta}{r} J_2^\alpha(\vec{q}_1, \vec{r}, t) d\vec{r} \right] = 0, \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial K^{\alpha\beta}}{\partial t} + 2P_k \left\{ \frac{\partial \vartheta^\alpha}{\partial q_1^\beta} \right\} + 2 \left\{ K^{\alpha\beta} \frac{\partial \vartheta^\beta}{\partial q_1^\gamma} \right\} + \frac{4}{5} \left\{ \frac{\partial S_k^\alpha}{\partial q_1^\beta} \right\} \\ - 2 \frac{\partial}{\partial q_1^\gamma} \frac{1}{4} \int \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{r^\gamma}{r} \{ r^\beta J_2^\alpha(\vec{q}_1, \vec{r}, t) \} d\vec{r} = - \frac{1}{\tau_1} K^{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_k^\alpha}{\partial t} + \frac{5}{2} \rho \left(\frac{k_B}{m} \right)^2 T \frac{\partial T}{\partial q_1^\alpha} + \frac{5}{2} S_k^\alpha \operatorname{div} \vec{\vartheta} + \frac{4}{5} S_k^\beta \left\{ \frac{\partial \vartheta^\alpha}{\partial q_1^\beta} \right\} + \frac{7}{2} \frac{\partial}{\partial q_1^\beta} \left(\frac{k_B T}{m} K^{\alpha\beta} \right) \\ + \frac{5}{2} \frac{k_B T}{m} \frac{\partial \sigma^{\alpha\beta}}{\partial q_1^\beta} - \frac{5}{2} \frac{k_B T \sigma^3}{m} \frac{\partial}{\partial q_1^\beta} \int \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{r^\alpha r^\beta}{r} n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t) d\vec{r} \\ = - \frac{1}{\tau_2} S_k^\alpha, \end{aligned} \quad (2.16)$$

где $\tau_1 = \frac{m}{2\beta}$ и $\tau_2 = \frac{1}{3} \frac{m}{\beta}$.

Итак, уравнения (2.12)-(2.16) с учетом (2.8) и явного вида $F(\vec{q}_1, \vec{r}, t)$ и $Q^\alpha(\vec{q}_1, \vec{r}, t)$ составляют полную систему уравнений обобщенной гидродинамики для жидкостей. С их помощью можно изучать вязкоупругие свойства и коэффициенты переноса жидкостей.

Динамическое поведение вязкоупругих свойств жидкостей было рассмотрено [127]. При этом тензор плотности потока импульса задается как [143]:

$$P^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t) = p \delta^{\alpha\beta} - \sigma'^{\alpha\beta} + \rho \vartheta^\alpha \vartheta^\beta = -\sigma^{\alpha\beta} + \rho \vartheta^\alpha \vartheta^\beta, \quad (2.17)$$

где $\sigma^{\alpha\beta}$ - тензор напряжений. При преобразовании Фурье оно равняется [127]:

$$\sigma^{\alpha\beta}(\omega, \vec{q}_1) = \tilde{K}(\omega) \text{div} \vec{U}(\omega, \vec{q}_1) + 2\tilde{\mu}(\omega) \left\{ \frac{\partial U^\alpha}{\partial q_1^\beta} \right\}, \quad (2.18)$$

где

$$\tilde{K}(\omega) = K(\omega) - i\omega\eta_V(\omega), \quad \tilde{\mu}(\omega) = \mu(\omega)i\omega\eta_S(\omega). \quad (2.19)$$

Здесь $\vec{U}(\omega, \vec{q}_1)$ обозначает Фурье-образ вектора смещения частиц, $\eta_V(\omega)$ и $\eta_S(\omega)$ -динамические коэффициенты объемной и сдвиговой вязкостей, $K(\omega)$ и $\mu(\omega)$ -динамический модуль объемной и сдвиговой упругостей, соответственно.

Рассмотрим малое отклонение состояния жидкости от равновесия. Тогда в линейном приближении последним членом в правой части (2.17) можно пренебречь. Согласно (2.17) и первому уравнению (2.13), получаем выражение для тензора напряжений $\sigma^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t)$ жидкостей следующего вида:

$$\sigma^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t) = P_k \delta^{\alpha\beta} + K^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t) - \frac{1}{2} \int \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{r^\alpha r^\beta}{r} n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t) d\vec{r}, \quad (2.20)$$

где

$$n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t) = n_2^0(|r|) + \tilde{n}_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t) + n'_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t). \quad (2.21)$$

Здесь $n_2^0(|r|) = n^2 g(r)$ и

$$\tilde{n}_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t) = n^2 g(r) \left[\left(\frac{\partial g(r)}{\partial n} \right)_T n'(\vec{q}_1, t) + \left(\frac{\partial g(r)}{\partial T} \right)_n T'(\vec{q}_1, t) \right],$$

где $n'(\vec{q}_1, t)$, $T'(\vec{q}_1, t)$ - соответственно, малые отклонения плотности и температуры от равновесных значений, которые для случая локального равновесия определяются уравнением (2.12), $n'_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t)$ - неравновесная бинарная плотность, определяемая в соответствии с (2.10).

Подставляя (2.21) в (2.12) и решения уравнений (2.14), (2.15) для случая независимых потоков в (2.20) и выполняя преобразование Фурье по времени, получаем для $\eta_S(\omega)$, $\eta_V(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ следующие выражения [2-А, 3-А, 6-А, 7-А]:

$$\eta_S(\omega) = \frac{nkT\tau}{1 + (\omega\tau)^2} + \frac{2\pi n^2 \sigma^3}{15} \int_0^\infty dr r^3 \frac{\partial \Phi(|\vec{r}|)}{\partial r} \int_{-\infty}^{+\infty} G_1(r, r_1, \omega) \frac{\partial g(|\vec{r}_1|)}{\partial r_1} r_1 d\vec{r}_1 \quad (2.22)$$

$$\eta_V(\omega) = \frac{2\pi n^2 \sigma^3}{3} \int_0^\infty dr r^3 \frac{\partial \Phi(|\vec{r}|)}{\partial r} \int_{-\infty}^{+\infty} G_1(r, r_1, \omega) \varphi_0(|\vec{r}_1|) d\vec{r}_1 \quad (2.23)$$

$$\mu(\omega) = \frac{nkT(\omega\tau)^2}{1 + (\omega\tau)^2} + \frac{2\pi n^2 \sigma^3 \omega}{15} \int_0^\infty dr r^3 \frac{\partial \Phi(|\vec{r}|)}{\partial r} \int_0^\infty G_2(r, r_1, \omega) \frac{\partial g(|\vec{r}_1|)}{\partial r_1} r_1 d\vec{r}_1 \quad (2.24)$$

$$K(\omega) = K_s + \frac{2\pi n^2 \sigma^3 \omega}{3} \int_0^\infty dr r^3 \frac{\partial \Phi(|\vec{r}|)}{\partial r} \int_{-\infty}^{+\infty} G_2(r, r_1, \omega) \varphi_0(|\vec{r}_1|) d\vec{r}_1 \quad (2.25)$$

где:

$$K_r(\omega) = \frac{2\pi n^2 \sigma^3 \omega}{3} \int_0^\infty dr r^3 \frac{\partial \Phi(|\vec{r}|)}{\partial r} \int_{-\infty}^{+\infty} G_2(r, r_1, \omega) \varphi_0(|\vec{r}_1|) d\vec{r}_1 \quad (2.26)$$

$K_s = n \left(\frac{\partial P}{\partial n} \right)_T + \frac{T}{nC_V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_n$ – адиабатический объёмный модуль упругости жидкости,

$$G_1(r, r_1, \omega) = \frac{\tau_0(2\pi\tau_0)^{-\frac{1}{2}}}{4\pi r r_1} \left(e^{-\varphi_1} (\sin\varphi_1 - \cos\varphi_1) - e^{-\varphi_2} (\sin\varphi_2 - \cos\varphi_2) \right),$$

$$G_2(r, r_1, \omega) = -\frac{\tau_0(2\pi\tau_0)^{-\frac{1}{2}}}{4\pi r r_1} \left(e^{-\varphi_1} (\sin\varphi_1 + \cos\varphi_1) - e^{-\varphi_2} (\sin\varphi_2 + \cos\varphi_2) \right),$$

$$\varphi_0(|\vec{r}_1|) = \frac{r_1}{3} \frac{\partial g(r_1)}{\partial r_1} - \left[n \left(\frac{\partial g(r_1)}{\partial n} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g(r_1)}{\partial T} \right)_n \right], \quad \varphi_1 = \frac{\alpha}{2} (r - r_1), \quad \varphi_2 =$$

$$\frac{\alpha}{2} (r + r_1), \quad \alpha = (2\omega\tau_0)^{\frac{1}{2}}, \quad \tau = \frac{m}{2\beta}, \quad \tau_0 = \frac{\beta\sigma^2}{2kT}, \quad \omega = 2\pi\nu - \text{циклическая}$$

частота, $\omega^* = \omega\tau$ – приведенная частота, $\Phi^*(r) = \frac{\Phi(r)}{kT}$ – приведенный

потенциал межмолекулярного взаимодействия.

Для проведения численных расчетов $\eta_s(\omega)$, $\eta_V(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$, согласно выражениям (2.22)-(2.26), необходим выбор потенциала межмолекулярного взаимодействия $\Phi(r)$ и радиальной функции распределения $g(r)$.

2.3. Исследование вязкоупругих свойств жидкостей при экспоненциальном законе затухания релаксирующих потоков

Процессы вязкого течения жидкости сопровождаются переносом массы, импульса и энергии между различными участками потока. Эти процессы приводят к возникновению явлений переноса, которые описываются с помощью коэффициентов диффузии, вязкости и теплопроводности. Даже при малых отклонениях от термодинамического равновесия транспортные потоки остаются пропорциональными градиентам соответствующих физических величин. При больших деформациях в жидкостях [144], помимо вязкости, проявляются упругие свойства, что позволяет рассматривать жидкость как вязкоупругую среду. Каждый тип переноса связан с определёнными упругими характеристиками, что обосновывает применение механических моделей Кельвина, Максвелла или Фойгта. Уравнения реологии в этих моделях содержат, как упругие, так и вязкие составляющие напряжения. Для описания акустических свойств используется комплексный модуль, действительная часть которого соответствует динамическому модулю упругости, а мнимая – частотнозависимой динамической вязкости.

Исследование транспортных и упругих свойств жидкостей осуществляется как методами феноменологической теории, так и на основе молекулярно-кинетического подхода. Феноменологическая теория описывает явления через макроскопические соотношения, используя термодинамику необратимых процессов, однако он не предоставляет возможности для глубокого изучения механизмов переноса. Молекулярно-кинетическое описание механизмов явлений переноса позволяет вывести закономерности этих процессов, опираясь на свойства жидкостей, их структурные изменения и характеристики внутренних релаксационных процессов. В результате получается система уравнений обобщённой гидродинамики, которая по форме аналогична макроскопическим гидродинамическим уравнениям, однако коэффициенты переноса в этих уравнениях зависят от пространственно-временных масштабов гидродинамических величин.

Применение преобразования Фурье к этим уравнениям позволяет получить аналитические выражения для частотнозависимых коэффициентов переноса и модулей упругости. Молекулярная теория дополнительно раскрывает механизмы явлений переноса в жидкостях, углубляя понимание феноменов, описанных феноменологической теорией.

Экспериментальные данные о релаксационных процессах в жидкостях [113] показали, что частотная дисперсия коэффициентов вязкости простирается от 10^2 до 10^5 , что выходит за рамки феноменологической теории. В связи с этим мы стремимся использовать единый микроскопический подход для изучения частотной дисперсии коэффициентов динамической вязкости жидкостей, учитывая вклады, как трансляционной, так и структурной релаксаций, которые зависят от специфики затухания потока импульса в импульсном и конфигурационном пространствах.

В этом параграфе рассмотрим восстановление равновесной структуры по экспоненциальному закону, т.е. в уравнении (2.8) релаксационный член Смолуховского $\omega_0 \hat{L} n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t)$ заменим на член, приводящий к экспоненциальному закону затухания:

$$\omega_0 \hat{L} n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t) = -\omega_0 \left[n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t) - n_2^{(0)}(|\vec{r}|, r, T) \right], \quad (2.27)$$

где $n_2^{(0)}[|\vec{r}|, n(|\vec{q}|, t), T(|\vec{q}|, t)] = n_2^{(0)}(|\vec{r}|) + \tilde{n}_2(|\vec{r}|, n, T)$ - локально-равновесная бинарная плотность, $n_2^{(0)}(|\vec{r}|) = n_0^2 g(|\vec{r}|)$ - равновесная бинарная плотность, а

$$\begin{aligned} \tilde{n}_2(|\vec{r}|, n(\vec{q}_1, t), T(\vec{q}_1, t)) \\ = \left(\frac{\partial n_2^{(0)}(|\vec{r}|)}{\partial n} \right)_T n(\vec{q}_1, t) + \left(\frac{\partial n_2^{(0)}(|\vec{r}|)}{\partial T} \right)_n T(\vec{q}_1, t). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Учитывая (2.27) и (2.28) и используя уравнение гидродинамики в локальном приближении, для Фурье-образа по времени функции $n_2(\vec{q}_1, \vec{r}, t)$ получим следующее решение [127]:

$$\begin{aligned}
n_2(\vec{q}, \vec{r}, \omega) = & n^2 g(|\vec{r}|) \\
& - n^2 \left[n \left(\frac{\partial \ln g(|\vec{r}|)}{\partial n} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g(|\vec{r}|)}{\partial T} \right)_n \right] \vec{\nabla} \vec{u}(\omega) \\
& + \frac{i\omega\tau_0 n^2}{1 - i\omega\tau_0} \left[\varphi_0(r) \vec{\nabla} \vec{u}(\omega) + \varphi^{\alpha\beta}(r) \left\{ \frac{\partial u^\alpha(\omega)}{\partial q_1^\beta} \right\} \right],
\end{aligned} \tag{2.29}$$

где: $\vec{u}(\omega)$ - Фурье – образ вектора смещение; $\vec{\nabla} \vec{u}(\omega) = \text{div} \vec{u}(\omega)$,

$$\varphi^{\alpha\beta}(r) = \frac{r^\alpha r^\beta - (1/3)r^2 \delta^{\alpha\beta}}{r} \frac{\partial g(|\vec{r}|)}{\partial r}, \quad \left\{ \frac{\partial u^\alpha(\omega)}{\partial q_1^\beta} \right\} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^\alpha}{\partial q_1^\beta} + \frac{\partial u^\beta}{\partial q_1^\alpha} - \frac{2}{3} \delta^{\alpha\beta} \text{div} \vec{u}(\omega) \right).$$

Совершая Фурье – преобразование по времени в (2.20) и учитывая (2.29), для динамических коэффициентов вязкости и динамического модуля упругости получим следующие выражения [1-А,6-А,7-А,9-А]:

$$\eta_s(\omega) = \frac{nkT\tau}{1 + (\omega\tau)^2} + \frac{2\pi}{15} \frac{n^2 kT \sigma^3 \tau_0}{1 + (\omega\tau_0)^2} \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \frac{\partial g(|\vec{r}|)}{\partial r} r^4 dr, \tag{2.30}$$

$$\eta_v(\omega) = \frac{2\pi}{3} \frac{n^2 kT \sigma^3 \tau_0}{1 + (\omega\tau_0)^2} \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \varphi_0(r) r^3 dr, \tag{2.31}$$

$$\begin{aligned}
\mu(\omega) = & \frac{nkT\omega^2}{1 + (\omega\tau)^2} \\
& + \frac{2\pi}{15} n^2 kT \sigma^3 \tau_0 \frac{\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2}{1 + \omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2} \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \frac{\partial g(|\vec{r}|)}{\partial r} r^4 dr,
\end{aligned} \tag{2.32}$$

$$K(\omega) = K_s - \frac{2\pi}{3} n^2 kT \sigma^3 \tau_0 \frac{\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2}{1 + \omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2} \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \varphi_0(r) r^3 dr, \tag{2.33}$$

где:

$$K_r(\omega) = \frac{2\pi}{3} n^2 kT \sigma^3 \tau_0 \frac{\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2}{1 + \omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2} \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \varphi_0(r) r^3 dr. \tag{2.34}$$

Формулы (2.30)-(2.33) также являются аналитическими выражениями динамических коэффициентов вязкостей $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$ и модулей упругости

$\mu(\omega)$ и $K(\omega)$, когда восстановление равновесной структуры жидкости происходит по экспоненциальному закону. Согласно выражениями (2.30)-(2.33), $\eta_s(\omega)$, $\eta_v(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ имеют низкочастотную асимптотику $\sim \omega^{-2}$, совпадающую с результатами общей релаксационной теории [1-А,11-А], а при высоких частотах остаются постоянными и независимыми от частоты внешнего воздействия.

В (2.30)-(2.33) подынтегральные выражения определяются посредством $\Phi(|\vec{r}|)$ и $g(|\vec{r}|)$, которые в литературе [146,147] при определенном выборе модели жидкости считаются известными.

Итак, для определения $\eta_s(\omega)$, $\eta_v(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ получены выражения (2.22)-(2.25) и (2.30)-(2.33). Эти выражения зависят от природы затухания тензора напряжений $\sigma^{\alpha\beta}(\vec{q}_1, t)$. В жидкостях при исследовании неравновесных явлений с учетом диссипации основную роль играют коллективные взаимодействия групп частиц. Поэтому при выводе исходного уравнения для одночастичных и двухчастичных функций распределения $f_1(\vec{x}_1, t)$ и $f_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$ была учтена, что коллективные взаимодействия учитываются динамическим членом Боголюбова. Поэтому при исследовании многоатомных и полярных жидкостей определение явного вида потенциала межмолекулярного взаимодействия с учетом, как межмолекулярных расстояний, так и пространственной угловой ориентации молекул является актуальным, что более подробно будет рассмотрено в главе 3.

Заключение к главе 2

На основе кинетических уравнений для функций распределения выведены уравнения обобщённой гидродинамики жидкостей, учитывающие внутренние релаксационные процессы. Получены аналитические выражения для коэффициентов переноса и упругих модулей, в которых учтены вклады трансляционной и структурной релаксации, когда восстановление структуры жидкостей происходит по степенному и экспоненциальному законам.

ГЛАВА III. ЧИСЛЕННЫЕ РАССЧЁТЫ КОЭФФИЦИЕНТОВ ВЯЗКОСТИ И МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ МНОГОАТОМНЫХ И ПОЛЯРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

3.1. Оптимальный выбор потенциала межмолекулярного взаимодействия, радиальной функции распределения и коэффициента трения для многоатомных и полярных жидкостей

Для определения характеристик конденсированных сред важно учитывать все виды взаимодействий. К ним относятся короткодействующие обменные и дисперсионные силы, а также дальнедействующие дипольные и кулоновские. При проведении подобных расчетов необходимо учитывать поляризационные вклады в энергию, которые обусловлены текущими конфигурациями локальных электростатических полей. Поляризация молекул приводит к образованию полей, формирующимися поляризуемыми молекулярными диполями среды. Это приводит к появлению пространственно-временных корреляций, которые оказывают влияние на локальное распределение молекул, их ориентацию и колебания на различных временных масштабах.

Межмолекулярные взаимодействия являются основным фактором, определяющим все процессы в конденсированных фазах, поэтому анализ равновесных и динамических свойств молекул в любых фазах требует учета потенциальной энергии взаимодействия между атомами и молекулами.

Динамические вязкоупругие свойства жидкостей, в отличие от их свойств при статических процессах, зависят от внутренних релаксационных явлений и молекулярной структуры. Описание этих свойств возможно исключительно на основе строгих статистических теорий.

Для проведения численных расчетов $\eta_s(\omega)$, $\eta_v(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ в соответствии с выражениями (2.22)–(2.25) и (2.30)–(2.33), необходимо выбрать потенциал межмолекулярного взаимодействия $\Phi(r)$ и радиальную функцию распределения $g(r)$.

В работах [146,147] для полярных жидкостей потенциал межмолекулярного взаимодействия $\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b)$ принимался в виде потенциа-

ла Штокмайера, который имеет вид

$$\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - \frac{d_a d_b}{r^3} V(\theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b), \quad (3.1)$$

где

$$V(\theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b) = 2\cos\theta_a\cos\theta_b - \sin\theta_a\sin\theta_b\cos(\xi_a - \xi_b). \quad (3.2)$$

Потенциал (3.1) был предложен Штокмайером в 1941 году для описания взаимодействия полярных молекул с большим дипольным моментом (рис. 1).

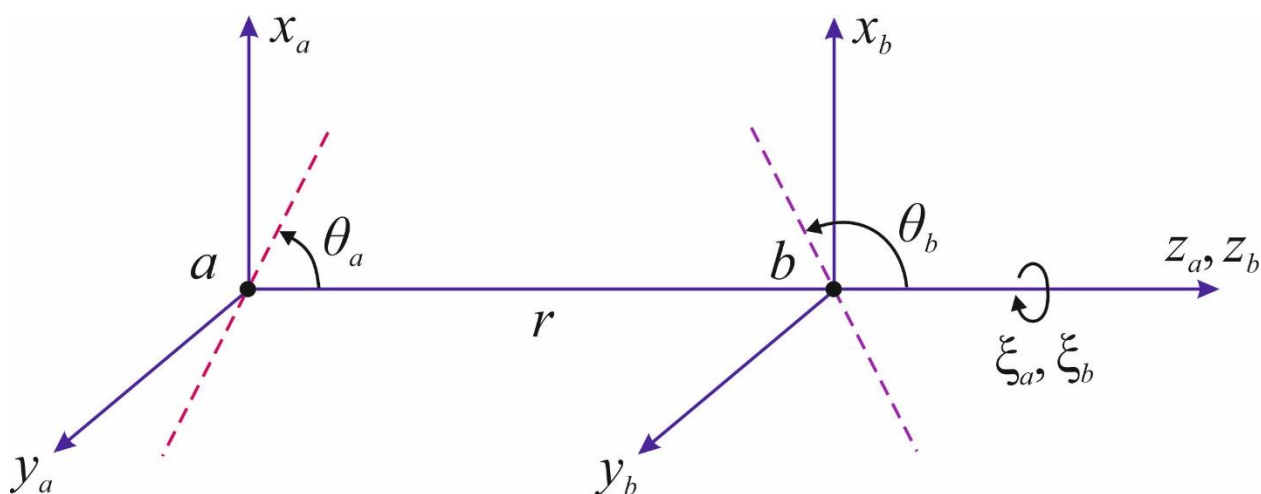


Рис. 3.1. Символы потенциала Штокмайера.

Этот потенциал представляет собой сочетание потенциала Леннарда-Джонса (12-6) и потенциала Кeesома, т.е. второй член правой части выражения (3.1):

$$W(\theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b) = -\frac{d_a d_b}{r^3} V(\theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b). \quad (3.3)$$

На практике потенциал Кeesома описывает взаимодействие двух непроницаемых сфер, каждая из которых имеет постоянный дипольный момент.

При анализе вязкоупругих свойств многоатомных жидкостей будем рассматривать неполярные жидкости, состоящие из квазисферических молекул, обладающих симметрией, близкой к шаровой. Важной характеристикой таких молекул является ацентричность, которая описывает отсутствие у

молекулы центра симметрии. Молекула считается ацентричной, если для неё невозможно найти точку, относительно которой все атомы молекулы имеют зеркальные отображения, расположенные на одинаковом расстоянии. Центр симметрии молекулы - это точка, через которую можно провести прямую, и в случае симметрии молекулы на противоположной стороне этой прямой будет находиться атом, являющийся зеркальным отражением атома на начальной точке. Например, молекулы с симметрией, такие как метан (CH_4) или диоксид углерода (CO_2), обладают симметрией.

С другой стороны, согласно работе [148], для жидкостей с симметричными молекулами, такими как жидкий метан (CH_4), тетрафторметан (CF_4), диоксид углерода (CO_2) и других, дипольный момент молекул равен нулю, т.е. $d_a = 0$ и $d_b = 0$. Поэтому при исследовании вязкоупругих свойств таких жидкостей в потенциале межмолекулярного взаимодействия (3.1) ограничимся потенциалом Леннард-Джонса, который имеет следующий вид:

$$\Phi_{ab}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (3.4)$$

Радиальная функция распределения $g(|\vec{r}_1|)$, согласно [149], принимает в вид

$$g(|\vec{r}|) = y(\rho^*) \exp \left(- \frac{\Phi(|\vec{r}|)}{kT} \right), \quad (3.5)$$

где $y(\rho^*)$ – бинарная функция распределения двух полостей, $r=r_{12}/\sigma$ – безразмерное взаимное расстояние молекул, σ – диаметр молекул.

В качестве контактного значения $y(\rho^*)$ на расстоянии $0 < r < \sigma$ ($r \approx 1$) примем выражение, полученное Карнаханом и Старлингом [130]:

$$y(\rho^*) = \frac{(2-\rho^*)}{2(1-\rho^*)^3}, \quad (3.6)$$

где $\rho^* = \frac{\pi}{6} N_0 \sigma^3 \frac{\rho}{M}$ – приведенная плотность жидкости.

На расстоянии $1 < r < 2$ (т. е. $\sigma < r_{12} < 2\sigma$) для $y(r)$ берем аналитическое выражение, полученное Вертхеймом [150] как решение уравнения Перкуса-Йевики для твердых сфер

$$y_1(\rho^*, r) = \frac{(1-\rho^*)^{-2}}{r} \sum_{l=0}^2 C_l e^{s_l(r-1)}, \quad (3.7)$$

где

$$C_l = \frac{1}{3} \sum_{m=0}^2 H_m J^m ,$$

$$\left. \begin{aligned} H_0 &= 1 + \frac{1}{2} \rho^* , \\ H_1 &= \frac{\sqrt{f^2 + \frac{1}{8}}}{4\rho^*} \left[x_2^2 (1 - 3\rho^* - 4\rho^{*2}) + x_1^2 \left(1 - \left(\frac{5}{2} \right) \rho^{*2} \right) \right] , \\ H_2 &= \frac{\sqrt{f^2 + \frac{1}{8}}}{4\rho^*} \left[x_1^2 (1 - 3\rho^* - 4\rho^{*2}) + x_2^2 \left(1 - \left(\frac{5}{2} \right) \rho^{*2} \right) \right] , \\ S_1 &= \frac{2\rho^*}{1-\rho^*} [(-1 + x_1 J^l + x_2 J^{-l})] , \quad j = \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\right) , \end{aligned} \right\} \quad (3.8)$$

$$x_{1,2} = \sqrt[3]{f \pm \sqrt{f^2 + \frac{1}{8}}} , \quad f = \frac{(3+3\rho^*-\rho^{*2})}{4\rho^*} . \quad (3.9)$$

Раскрывая сумму в (3.7) и используя выражения (3.8), (3.9), для $y_1(\rho, r)$ в интервале $1 < r < 2$ получим

$$y_1(\rho^*, r) = \frac{C_0 e^{t_0(r-1)} + \frac{2}{3} C_1 e^{\gamma(1+\alpha_1)(r-1)}}{r(1-\rho^*)^2} , \quad (3.10)$$

где

$$C_0 = \frac{1}{3} (H_0 + H_1 + H_2) , \quad t_0 = \gamma(1 - 2\alpha_1) ,$$

$$C_1 = N_0 \cos[\gamma\beta(r-1)] + N_1 \sin[\gamma\beta(r-1)] , \quad \beta = \frac{\sqrt{3}}{2} (x_1 + x_2) ,$$

$$\gamma = 2\rho^*(1 - \rho^*) , \quad \alpha_1 = \frac{1}{2} (x_1 + x_2) , \quad N_0 = H_0 - \frac{H_1 + H_2}{2} , \quad N_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} (H_1 - H_2) .$$

В интервале $2 < r < 5$ (т.е. $2\sigma < r_{12} < 5\sigma$) согласно [151] решение уравнения Перкуса-Йевики имеет вид

$$y_2(\rho^*) = \frac{(\rho^*-4)(\rho^{*2}+2)^2}{24(2\rho^*+1)^2} . \quad (3.11)$$

Согласно [151], данное решение вклада $y_2(\rho^*)$ мало, поэтому в интервале $2 < r < 5$ им пренебрегаем, т.е. $y_2(\rho^*) \approx 1$.

Выражение (3.5) с учетом (3.6), (3.10) и (3.11) при заданном потенциале взаимодействия между молекулами жидкости (3.4) определяет аналитический вид равновесной радиальной функции распределения $g(r)$ в

области $0 < r < 5$, как функции температуры, плотности многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами.

При расчетах, следуя вышеказанному, радиальную функцию распределения принимаем в следующем видах:

$$g(\rho^*, r) = y(\rho^*) \exp\left(-\frac{\Phi(r)}{kT}\right), \quad (3.12)$$

$$g_1(\rho^*, r) = y_1(\rho^*, r) \exp\left(-\frac{\Phi(r)}{kT}\right), \quad (3.13)$$

$$g_2(r) = \exp\left(-\frac{\Phi(r)}{kT}\right). \quad (3.14)$$

Для теоретического исследования переноса в жидкостях используются два подхода:

- 1) модель твёрдообразной структуры жидкостей;
- 2) кинетический анализ.

В первой модели механизма переноса атомы или молекулы перемещаются в вакансии квазирешётки, преодолевая потенциальный барьер. Поток массы зависит от концентрации вакансий и скорости преодоления барьера, а для потока импульса сдвиговые напряжения вызывают искажение барьера, что создаёт предпочтительное направление потока [1,92,113]. Это вызывает экспоненциальное изменение коэффициентов диффузии и вязкости с температурой, что затрудняет установление связи между величиной свободной энергии возбуждения и молекулярными характеристиками жидкости.

Во втором подходе переносные явления в жидкостях описываются кинетическими уравнениями для неравновесных функций распределения. Из уравнений плотности массы, импульса и энергии получают гидродинамические уравнения, в которых тензор напряжений и тепловой поток описывают необратимые процессы. Усреднив их с помощью неравновесных функций, получают выражения для коэффициентов переноса и модулей упругости. Для их вычисления используют молекулярные параметры жидкости, однако существует параметр, не определяемый в рамках данных теорий. Этим параметром является коэффициент трения β .

Хотя задача точного определения коэффициента трения β остаётся открытой, в работе [152] предложены различные модели для его вычисления. В работе [127] с помощью вычисления автокорреляционной функции импульсов и определения средней силы, действующей на частицу, было получено выражение для коэффициента трения β вида

$$\beta^2 = \rho\sigma \int_0^\infty \nabla^2 \Phi(r) g(r) d\vec{r}, \quad (3.15)$$

где ρ - плотность жидкости, $\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$ - радиальная часть оператора Лапласа.

Используя выражения (3.12)-(3.14) для $g(r)$, можно рассчитать значение коэффициента трения жидкостей β согласно [1-А,2-А,3-А,6-А,11-А] в широком интервале изменения температуры, давления и плотности по формуле:

$$\begin{aligned} \beta^2 = \rho\sigma & \left(\int_0^1 \nabla^2 \Phi(r) g(\rho^*, r) d\vec{r} + \right. \\ & \left. + \int_1^2 \nabla^2 \Phi(r) g_1(\rho^*, r) d\vec{r} + \int_2^5 \nabla^2 \Phi(r) g_2(r) d\vec{r} \right). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Учет формул (3.4), (3.12)-(3.16) в выражениях (2.22)-(2.25) и (2.30)-(2.33) позволяет провести численный расчет коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей, модулей объёмной $K(\omega)$ релаксационной $K_r(\omega)$ и сдвиговой $\mu(\omega)$ упругостей в широком диапазоне термодинамических параметров состояния для многоатомных жидкостей.

3.2. Численные расчёты вязкостных и упругих свойств

**многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами
в зависимости от частоты и термодинамических параметров состояния**

Вязкоупругие свойства жидкостей описывают их поведение в условиях, когда одновременно проявляются как вязкость, так и упругость, что играет важную роль в процессах, связанных с текучестью и деформациями

жидкостей под действием различных внешних факторов. Знание этих свойств необходимо для разработки новых материалов, в частности, в нефтехимической, фармацевтической и других отраслях, где жидкости подвергаются различного рода деформациям, учёт которых требует обязательного знания их вязких и упругих характеристик одновременно. Кроме того, исследование вязкоупругих свойств важно и для биофизики, особенно при анализе свойств биологических жидкостей, таких как кровь, лимфа и другие жидкости живых организмов. Эти жидкости обладают как вязкими, так и упругими характеристиками, что делает их поведение более сложным и требует применения специализированных методов исследования. Особое внимание следует уделить многоатомным жидкостям с квазисферическими молекулами, которые обладают специфическими физико-химическими свойствами, делающими их незаменимыми в ряде высокотехнологичных приложений. Эти молекулы, обладая почти сферической симметрией, открывают новые возможности для создания жидкостей с особыми механическими, термическими и оптическими свойствами.

Вышеперечисленные теоретические и экспериментальные исследования (параграфы 1.1-1.3) показывают, что динамические вязкоупругие свойства жидкостей можно адекватно описать, в первую очередь, с учетом молекулярной структуры, а во вторую- с учетом механизмов происходящих в них внутренних релаксационных процессов. Строгие статистические теории жидкостей позволяют учитывать сложные взаимодействия между молекулами, а также влияние таких факторов, как размерные эффекты, ориентация молекул и наличие дисперсных фаз. Такой подход, в том числе, относится к полярным жидкостям с учетом, как молекулярной структуры, так и внутренних релаксационных процессов. Поэтому целью настоящего раздела является исследование коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей, а также соответствующих им модулей сдвиговой $\mu(\omega)$ и объёмной $K(\omega)$ упругостей многоатомных жидкостей в зависимости от термодинамических параметров состояния.

При этом, как и в случае определения коэффициента трения жидкостей β , для радиальной функции распределения используем выражения (3.12)-(3.14), после чего выражения (2.22)-(2.25) принимают вид:

а) в случае диффузионного закона затухания тензора напряжения

$$\begin{aligned} \eta_s(\omega) &= \frac{\rho N_A kT}{M} \frac{\tau}{1 + (\omega *)^2} \\ &+ \frac{2\pi}{15} \left(\frac{\rho N_A}{M} \right)^2 \sigma^3 kT \tau_0 \left(\int_0^1 dr r^2 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_0^1 G_1(r, r_1, \omega) \frac{\partial g(\rho^*, r_1)}{\partial r_1} r_1^2 dr_1 \right. \\ &\quad \left. + \int_1^2 dr r^2 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_1^2 G_1(r, r_1, \omega) \frac{\partial g_1(\rho^*, r_1)}{\partial r_1} r_1^2 dr_1 + \right. \\ &\quad \left. + \int_2^5 dr r^2 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_2^5 G_1(r, r_1, \omega) \frac{\partial g_2(r_1)}{\partial r_1} r_1^2 dr_1, \right. \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \eta_v(\omega) &= \frac{\pi}{3} \left(\frac{\rho N_A}{M} \right)^2 \sigma^3 kT \tau_0 \times \\ &\times \left\{ \int_0^1 dr r \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_0^1 G_1(r, r_1, \omega) \left(\frac{r_1}{3} \frac{\partial g(\rho^*, r_1)}{\partial r_1} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \left[\rho \left(\frac{\partial g(\rho^*, r_1)}{\partial \rho} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g(\rho^*, r_1)}{\partial T} \right)_\rho \right] \right) \right. \\ &\quad \left. + \int_1^2 dr r \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_1^2 G_1(r, r_1, \omega) \left(\frac{r_1}{3} \frac{\partial g_1(\rho^*, r_1)}{\partial r_1} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \left[\rho \left(\frac{\partial g_1(\rho^*, r_1)}{\partial \rho} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g_1(\rho^*, r_1)}{\partial T} \right)_\rho \right] \right) \right. \\ &\quad \left. + \int_2^5 dr r \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_1^2 G_1(r, r_1, \omega) \frac{r_1}{3} \frac{\partial g_2(r_1)}{\partial r_1} - \gamma T \left(\frac{\partial g_2(r_1)}{\partial T} \right)_\rho \right\} \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \mu(\omega) &= \frac{\rho N_A kT}{M} \frac{(\omega *)^2}{1 + (\omega *)^2} + \\ &+ \frac{2\pi}{15} \left(\frac{\rho N_A}{M} \right)^2 \sigma^3 kT \frac{\tau_0}{\tau} \omega^* \left(\int_0^1 dr r^2 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_0^1 G_2(r, r_1, \omega) \frac{\partial g(\rho^*, r_1)}{\partial r_1} r_1^2 dr_1 + \right. \\ &\quad \left. + \int_1^2 dr r^2 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_1^2 G_2(r, r_1, \omega) \frac{\partial g_1(\rho^*, r_1)}{\partial r_1} r_1^2 dr_1 + \right. \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$+ \int_2^5 dr r^2 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_2^5 G_2(r, r_1, \omega) \frac{\partial g_2(r_1)}{\partial r_1} r_1^2 dr_1,$$

$$\begin{aligned} K_r(\omega) = & \frac{\pi}{3} \left(\frac{\rho N_A}{M} \right)^2 \sigma^3 kT \frac{\tau_0}{\tau} \omega^* \times \\ & \times \left\{ \int_0^1 dr r \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_0^1 G_2(r, r_1, \omega) \left(\frac{r_1}{3} \frac{\partial g(\rho^*, r_1)}{\partial r_1} \right. \right. \\ & \left. \left. - \left[\rho \left(\frac{\partial g(\rho^*, r_1)}{\partial \rho} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g(\rho^*, r_1)}{\partial T} \right)_\rho \right] \right) \right. \\ & + \int_1^2 dr r \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_1^2 G_2(r, r_1, \omega) \left(\frac{r_1}{3} \frac{\partial g_1(\rho^*, r_1)}{\partial r_1} \right. \\ & \left. - \left[\rho \left(\frac{\partial g_1(\rho^*, r_1)}{\partial \rho} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g_1(\rho^*, r_1)}{\partial T} \right)_\rho \right] \right) \\ & + \int_2^5 dr r \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \int_1^2 G_2(r, r_1, \omega) \frac{r_1}{3} \frac{\partial g_2(r_1)}{\partial r_1} \\ & \left. - -\gamma T \left(\frac{\partial g_2(r_1)}{\partial T} \right)_\rho \right\}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$K(\omega) = K_s + K_r(\omega). \quad (3.21)$$

б) в случае экспоненциального закона затухания тензора напряжения

$$\begin{aligned} \eta_s(\omega) = & \frac{\rho N_A kT}{M} \frac{\tau}{1 + (\omega^*)^2} \\ & + \frac{2\pi}{15} \left(\frac{\rho N_A}{M} \right)^2 \sigma^3 kT \tau_0 \left(\int_0^1 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{\partial g(\rho^*, r)}{\partial r} r^4 dr + \right. \\ & + \int_1^2 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{\partial g_1(\rho^*, r)}{\partial r} r^4 dr + \int_0^1 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{\partial g_2(r)}{\partial r} r^4 dr, \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\eta_v(\omega) = \frac{\pi}{3} \left(\frac{\rho N_A}{M} \right)^2 \sigma^3 kT \tau_0 \times \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ \int_0^1 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \left(\frac{r}{3} \frac{\partial g(\rho^*, r_1)}{\partial r} - \left[\rho \left(\frac{\partial g(\rho^*, r)}{\partial \rho} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g(\rho^*, r)}{\partial T} \right)_\rho \right] \right) r^3 dr \right. \\
& \quad + \int_2^5 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \left(\frac{r}{3} \frac{\partial g_1(\rho^*, r)}{\partial r} - \left[\rho \left(\frac{\partial g_1(\rho^*, r)}{\partial \rho} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g_1(\rho^*, r)}{\partial T} \right)_\rho \right] \right) + \\
& \quad \left. + \int_2^5 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \left(\frac{r}{3} \frac{\partial g_2(r)}{\partial r} - \gamma T \left(\frac{\partial g_2(r)}{\partial T} \right)_\rho \right) \right\} \\
\mu(\omega) &= \frac{\rho N_A kT}{M} \frac{(\omega^*)^2}{1 + (\omega^*)^2} \\
& \quad + \frac{2\pi}{15} \left(\frac{\rho N_A}{M} \right)^2 \sigma^3 kT \frac{\tau_0}{\tau} \omega^* \left(\int_0^1 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{\partial g(\rho^*, r)}{\partial r} r^4 dr + \right. \\
& \quad \left. + \int_1^2 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{\partial g_1(\rho^*, r)}{\partial r} r^4 dr + \int_0^1 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \frac{\partial g_2(r)}{\partial r} r^4 dr \right) \quad (3.24)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_r(\omega) &= \frac{\pi}{3} \left(\frac{\rho N_A}{M} \right)^2 \sigma^3 kT \frac{\tau_0}{\tau} \omega^* \times \\
& \times \left\{ \int_0^1 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \left(\frac{r}{3} \frac{\partial g(\rho^*, r_1)}{\partial r} - \left[\rho \left(\frac{\partial g(\rho^*, r)}{\partial \rho} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g(\rho^*, r)}{\partial T} \right)_\rho \right] \right) r^3 dr \right. \\
& \quad + \int_2^5 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \left(\frac{r}{3} \frac{\partial g_1(\rho^*, r)}{\partial r} - \left[\rho \left(\frac{\partial g_1(\rho^*, r)}{\partial \rho} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g_1(\rho^*, r)}{\partial T} \right)_\rho \right] \right) + \\
& \quad \left. + \int_2^5 \frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} \left(\frac{r}{3} \frac{\partial g_2(r)}{\partial r} - \gamma T \left(\frac{\partial g_2(r)}{\partial T} \right)_\rho \right) \right\} \quad (3.25)
\end{aligned}$$

$$K(\omega) = K_s + K_r(\omega). \quad (3.26)$$

В качестве таких жидкостей с квазисферическими молекулами рассмотрены жидкий метан (CH_4), тетрафторметан (CF_4) и диоксид углерода

(CO₂) [160,166]. Молекулярные параметры, входящие в потенциал Леннарда-Джонса (ϵ/k , σ), взяты из работ [147,153], а соответствующие экспериментальные значения плотности и температуры - из [11,154,155].

Для количественного сравнения результатов численных расчетов с экспериментальными данными в табл. 3.1 – 3.3 приведены теоретические значения $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$ в зависимости от температуры и плотности, вычисленные по формулам (3.17), (3.18), (3.22), (3.23) при приведённой частоте 10^{-5} для жидких CH₄, CF₄ и CO₂. Из таблиц следует, что полученные результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными.

Таблица 3.1

Изочастотные зависимости $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$ от температуры и плотности для жидкого CH₄ ($\omega\tau = \omega^* = 10^{-5}$).

Т, К[155]	ρ , кг/м ³ [155]	η_s , мПа · с			η_v , мПа · с		η_v/η_s	
		[155]	форм. (3.22)	форм. (3.17)	форм. (3.23)	форм. (3.18)	фор.(3.23)/ фор.(3.22)	фор.(3.18)/ фор.(3.17)
91,01	453,0	0,1990	0,2760	0,2362	3,2091	1,2477	11,625	5,282
93,77	450,0	0,1820	0,2519	0,2153	2,8437	1,1043	11,289	5,128
97,34	446,0	0,1620	0,2249	0,1922	2,4427	0,9484	10,861	4,934
100,88	441,0	0,1460	0,2012	0,1720	2,0989	0,8147	10,433	4,736
103,84	437,0	0,1380	0,1841	0,1576	1,8570	0,7217	10,087	4,578
107,05	433,0	0,1270	0,1681	0,1443	1,6345	0,6371	9,724	4,416
109,76	429,0	0,1200	0,1556	0,1339	1,4655	0,5726	9,418	4,277
114,13	422,0	0,1120	0,1377	0,1190	1,2295	0,4825	8,930	4,055

Согласно данным таблиц 3.1 и 3.3, численные значения отношения $\eta_v(\omega)/\eta_s(\omega)$ лежит примерно в интервале от 1 до 10 при фиксированной частоте. В соответствии с релаксационной теорией [114], в данном интервале измерений проявляется вклад структурной релаксации в вязкоупругие свойства жидкостей.

Таблица 3.2.

Изочастотные зависимости $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$ от температуры
и плотности для жидких CH_4 и CF_4 ($\omega\tau = \omega^* = 10^{-5}$).

Метан (CH_4)					Тетрафторметане (CF_4)				
Т, К[11]	ρ , кг/м ³ [11]	η_s , мПа · с			Т, К[11]	ρ , кг/м ³ [11]	η_s , мПа · с		
		[11]	форм. (3.22)	форм. (3.17)			[11]	форм. (3.22)	форм. (3.17)
100,0	440,0	0,1590	0,2047	0,1747	90,0	1906,5	3,5000	3,0406	2,4706
120,0	413,0	0,0980	0,1180	0,1027	110,0	1814,0	1,4700	1,6853	1,4033
140,0	380,0	0,0660	0,0726	0,0655	130,0	1713,0	0,7420	1,0551	0,8794
150,0	361,0	0,0520	0,0575	0,0529	150,0	1604,0	0,4570	0,7032	0,5801
160,0	339,0	0,0370	0,0452	0,0423	170,0	1478,0	0,3100	0,4741	0,3865
170,0	312,0	0,0320	0,0346	0,0329	190,0	1339,0	0,2310	0,3527	0,2799
180,0	277,0	0,0250	0,0251	0,0240	200,0	1225,0	0,2000	0,2367	0,1925

Таблица 3.3.

Изочастотные зависимости $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$ от температуры
и плотности для жидкого CO_2 ($\omega\tau = \omega^* = 10^{-5}$).

Т, К[154]	ρ , кг/м ³ [154]	η_s , мПа · с			η_v , мПа · с		η_v/η_s	
		[154]	форм. (3.22)	форм. (3.17)	форм. (3.23)	форм. (3.18)	фор.(3.23)/ фор.(3.22)	фор.(3.18)/ фор.(3.17)
224,3	1151,5	0,2220	0,2276	0,2801	1,6239	3,1286	7,135	11,171
233,4	1115,1	0,2030	0,1991	0,2470	1,3310	2,5624	6,684	10,376
243,1	1075,4	0,1710	0,1727	0,2158	1,0759	2,0667	6,231	9,576
253,2	1031,6	0,1470	0,1482	0,1866	0,8565	1,6388	5,778	8,782
262,4	982,2	0,1270	0,1263	0,1594	0,6747	1,2849	5,340	8,059
273,9	926,4	0,1060	0,1047	0,1328	0,5081	0,9590	4,852	7,223
278,4	897,8	0,0960	0,0957	0,1212	0,4434	0,8335	4,634	6,876
283,5	865,6	0,0880	0,0863	0,1092	0,3791	0,7089	4,393	6,489
288,5	824,4	0,0800	0,0760	0,0957	0,3125	0,5806	4,112	6,064
293,6	773,5	0,0730	0,0649	0,0811	0,2457	0,4529	3,783	5,581
298,8	706,7	0,0640	0,0527	0,0649	0,1776	0,3239	3,372	4,991
303,2	608,6	0,0550	0,0383	0,0458	0,1071	0,1925	2,797	4,199

На рис. 3.1 и 3.2 приведены частотные зависимости $\eta_s(\omega)$ согласно формулам (3.17), (3.22) и $\eta_V(\omega)$ по формулам (3.18), (3.23) для жидкого метана при фиксированных $T=100$ К и $T=150$ К. Видно, что область частотной дисперсии $\eta_s(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$, согласно (3.17) и (3.18), составляет 5 декад, совпадающих с экспериментальными данными работ [113,114], что соответствует учету влияния структурной релаксации на коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей жидкостей. Результаты, частотной дисперсии полученное по формуле (3.22) для $\eta_s(\omega)$ и (3.23) для $\eta_V(\omega)$ дают примерно 2 декады, что является результатом экспоненциального закона затухания потоков и эта область соответствует результатам релаксационной теории и экспериментальным результатам [113,114].

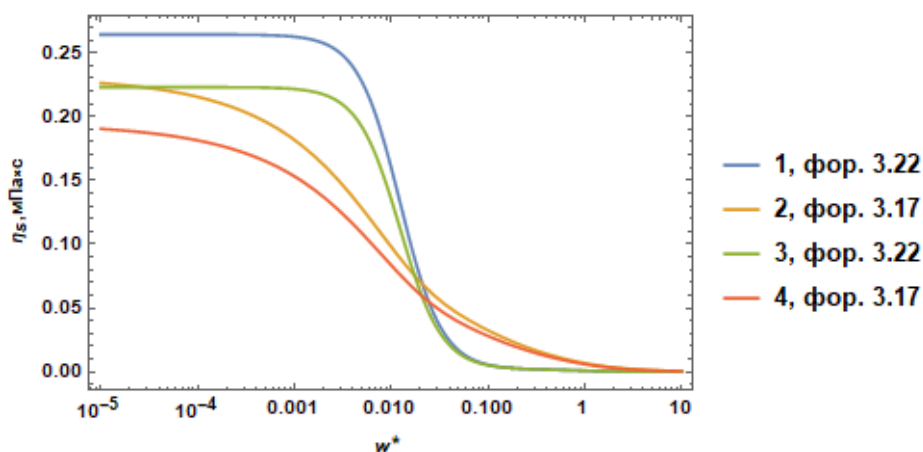


Рис. 3.1. Изотермическая частотная зависимость $\eta_s(\omega)$ жидкого CH_4 :
1 и 2 при $T=100$ К; 3 и 4 при $T=150$ К.

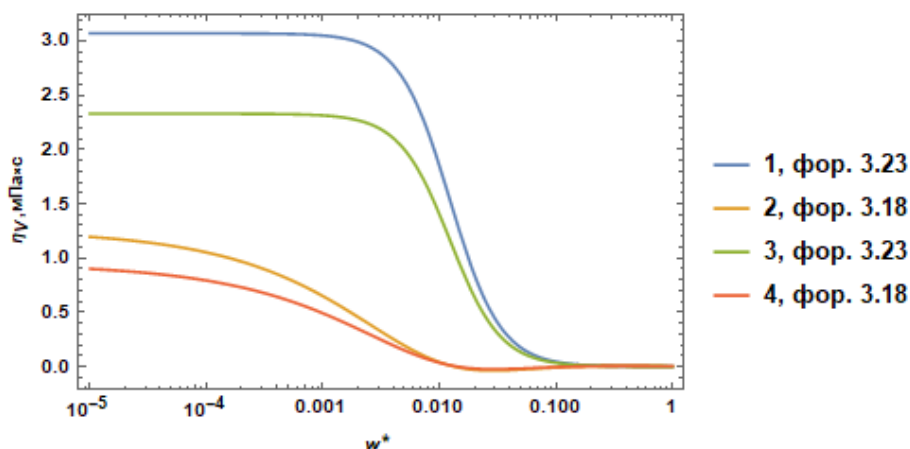


Рис. 3.2. Изотермическая частотная зависимость $\eta_V(\omega)$ жидкого CH_4 :
1 и 2 при $T=100$ К; 3 и 4 при $T=150$ К.

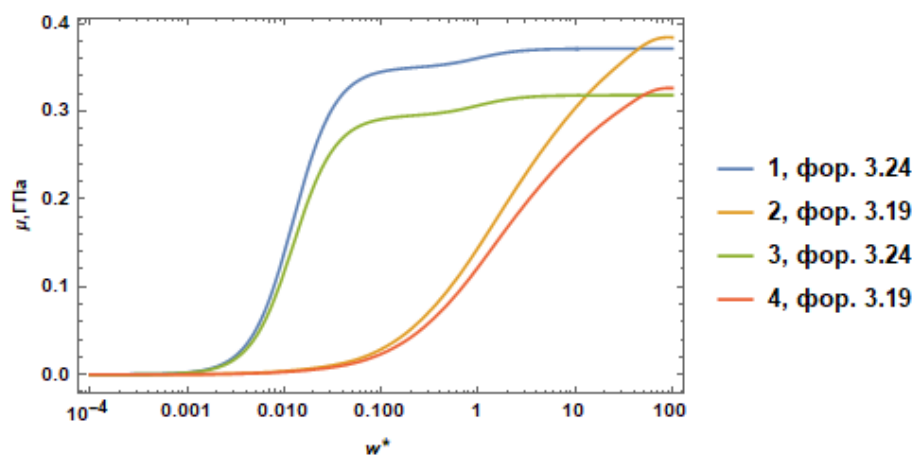


Рис. 3.3. Изотермическая частотная зависимость $\mu(\omega)$ жидкого CH_4 :
1 и 2 при $T=100$ К; 3 и 4 при $T=150$ К.

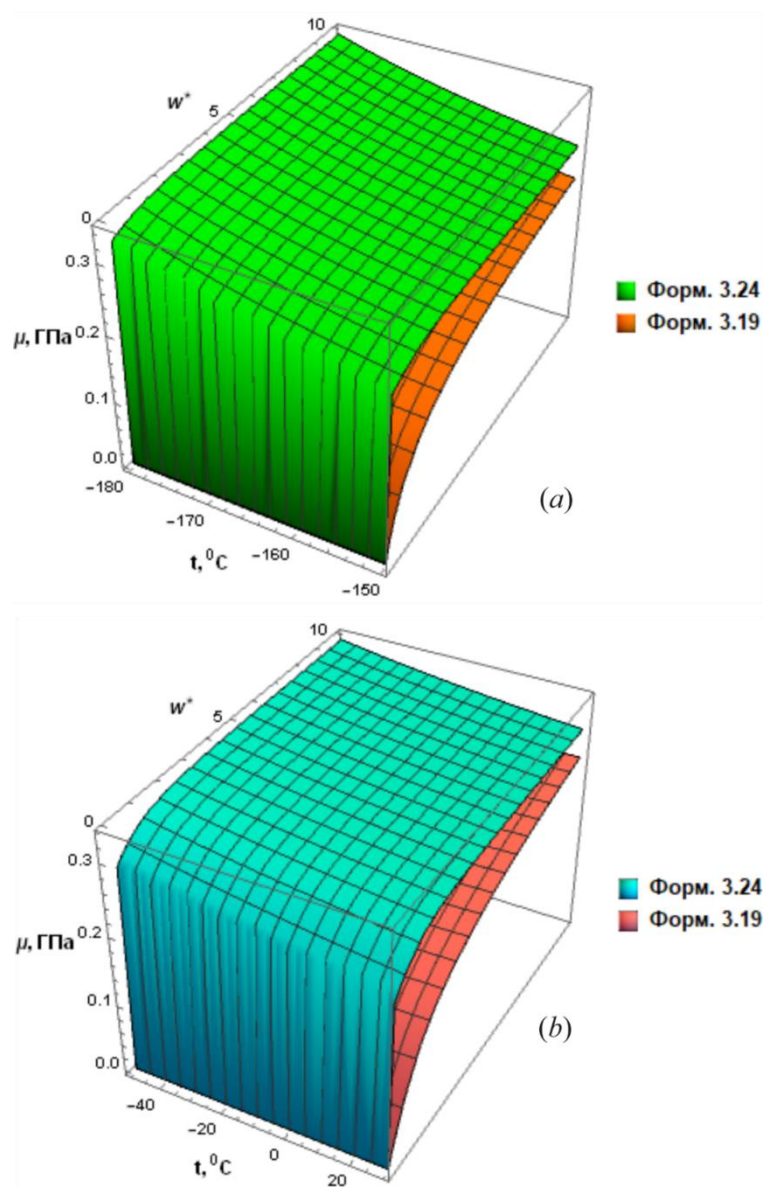


Рис. 3.4. Зависимость $\mu(\omega)$ от приведенной частоты ω^* и температуры:
(a)- для жидкого CH_4 ; (b)- для жидкого CO_2 .

На рис. 3.3 показан результат численного расчета частотной зависимости динамического сдвигового модуля упругости $\mu(\omega)$ согласно формулам (3.19), (3.24) для жидкого метана для двух температур $T=100$ К и $T=150$ К. Как видно из рис.3.3, область частотной дисперсии $\mu(\omega)$, согласно (3.19), составляет примерно 5 декад, а частотные дисперсии, полученные по формуле (3.24) дают две декады и являются результатом экспоненциального закона затухания тензора напряжения.

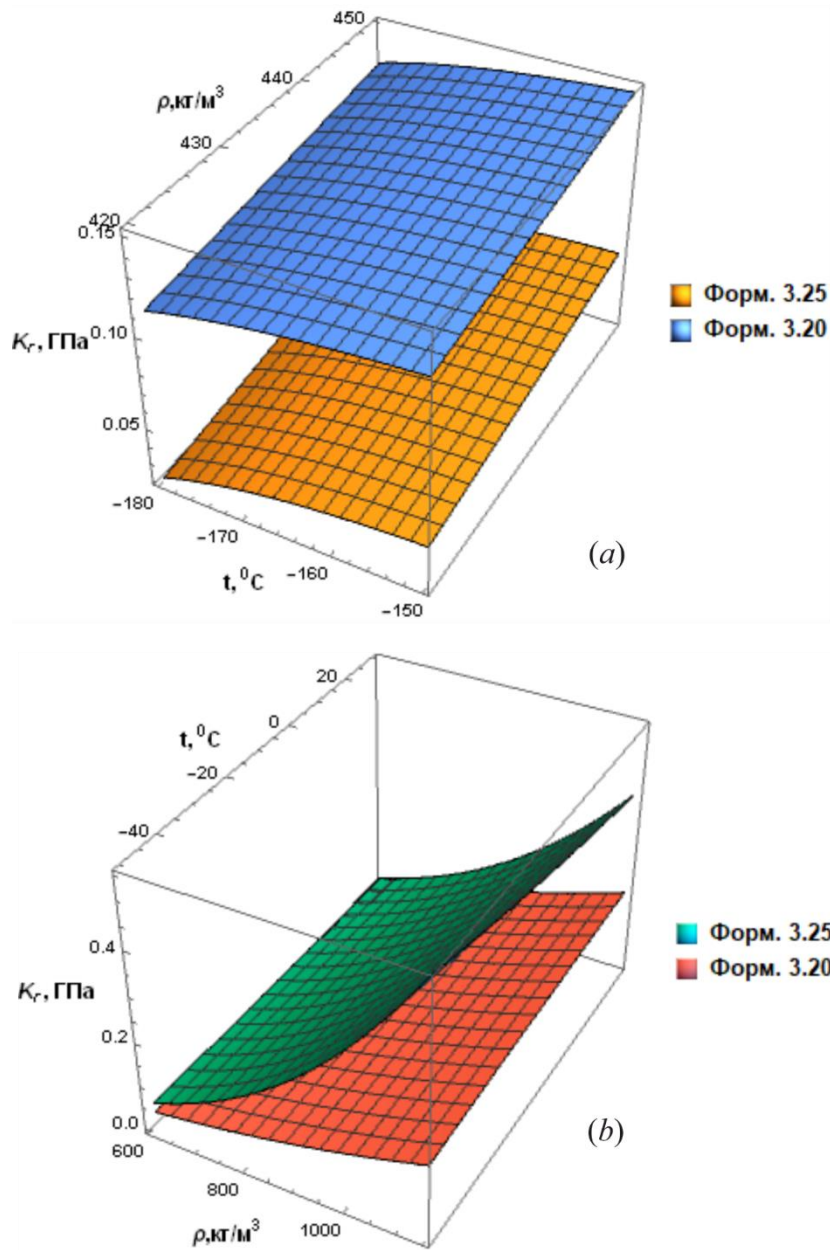


Рис. 3.5. Зависимость $K_r(\omega)$ от температуры и плотности при $\omega * = 10^{-5}$:
(a) для жидкого CH_4 ; (b)- для жидкого CO_2 .

Также на рис. 3.4. представлены зависимости модуля сдвиговой упругости $\mu(\omega)$ от частоты и температуры для жидкого CH_4 и CO_2 . С увеличением температуры $\mu(\omega)$ уменьшается. Область частотной дисперсии $\mu(\omega)$, основанная на формуле (3.19), является широкой, а по формуле (3.24) - узкой, что соответствует результатам общей релаксационной теории жидкостей [114].

На рис. 3.5 показана зависимость $K_r(\omega)$ для жидкого CH_4 и CO_2 от температуры и плотности.

Из таблиц 1-3 и рис. 3.1 и 3.2 видно, что $\mu(\omega)$, и $K_r(\omega)$ зависят от закона затухания релаксирующих потоков по-разному, что обусловлено учетом вкладов релаксационных процессов в эти величины. Следовательно, вязкоупругие свойства многоатомных жидкостей тесно связаны с природой восстановления равновесного состояния.

3.3. Численные расчёты зависимости динамических коэффициентов вязкостей и модулей упругости полярных жидкостей от частоты, плотности и температуры

Сложность поведения полярных жидкостей вызывает необходимость учета всех типов межмолекулярного взаимодействия. К таким взаимодействиям относятся короткодействующие обменные (отталкивательное) и дисперсионные силы, а также дальнедействующие дипольные и кулоновские взаимодействия. Эти силы оказывают значительное влияние на поляризационные вклады в энергию, которые, в свою очередь, зависят от моментальных распределений локальных электростатических полей в среде. Межмолекулярные взаимодействия, в соответствии с теорией химической связи, в значительной степени обусловлены электростатическими силами, зависящими от распределения электронной плотности взаимодействующих молекул. Квантово-механические расчеты, основанные на решении уравнения Шредингера для различных конфигураций молекул, позволяют точно определить

потенциальную энергию взаимодействий между ними. Эти расчеты учитывают, как статические, так и динамические аспекты электронных облаков, что дает возможность более глубоко понять природу и силу межмолекулярных взаимодействий. Таким образом, используя методы квантовой механики, можно получить детализированную картину взаимодействий, что является важным для предсказания свойств веществ и их поведения в различных условиях. Однако, из-за сложности моделей, которые включают множество параметров, применение таких расчетов в аналитических теориях ограничено. Эти взаимодействия играют ключевую роль в определении физических и химических свойств конденсированных фаз. Без учета потенциальных функций взаимодействия между молекулами невозможно корректное обсуждение равновесных и динамических характеристик.

Для анализа и расчетов в конденсированных фазах необходимо учитывать все типы межмолекулярного взаимодействия. Важно также учитывать поляризационные эффекты, которые оказывают влияние на электронную плотность во взаимодействии молекул, что приводит к созданию взаимосвязанных полей и пространственным корреляциям.

Динамические вязкоупругие свойства жидкостей, в первую очередь, можно адекватно описать только с учетом молекулярной структуры, а во вторую- с учётом механизмов внутренних релаксационных процессов в них. В отличие от простых моделей жидкостей, которые могут учитывать только усредненные характеристики, строгие статистические теории позволяют учитывать сложные взаимодействия между молекулами, а также влияние различных факторов, таких как размерные эффекты, ориентация молекул и наличие дисперсных фаз. Исследование полярных жидкостей и их свойств требует всестороннего подхода. При этом в первую очередь надо учитывать молекулярную структуру жидкостей и внутренние релаксационные процессы, происходящих в них. Поэтому систематическое рассмотрение и подробный анализ механизмов релаксационных процессов, а также

определение их вклада в динамические характеристики полярных жидкостей на основе статистической теории являются критически важными.

Целью данного раздела является определение области частотной дисперсии коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей и соответствующих им модулей сдвиговой $\mu(\omega)$ и объёмной $K(\omega)$ упругостей полярных жидкостей, а также исследование зависимости $\eta_s(\omega)$, $\eta_v(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ от термодинамических параметров состояния и угловой ориентации молекул. При этом воспользуемся аналитическими выражениями для $\eta_s(\omega)$, $\eta_v(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$, которые были получены на основе кинетических уравнений для одночастичной $f_1(\vec{x}_1, t)$ и двухчастичной $f_a(\vec{x}_1, \vec{x}_2, t)$ функций распределения в случае затухания релаксирующих потоков по степенному и экспоненциальному законам. Подробно методы получения выражений для $\eta_s(\omega)$, $\eta_v(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ рассмотрены в работах [1-A, 2-A, 7-A, 8-A, 9-A, 10-A, 14-A, 15-A].

Учет формул (3.1), (3.12)-(3.14) и (3.16) в выражениях (2.17)-(3.25) позволил провести численный расчет коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей, модулей объёмной $K(\omega)$, релаксационной $K_r(\omega)$, адиабатической K_s и сдвиговой $\mu(\omega)$ упругостей в широком диапазоне термодинамических параметров состояния и частот для полярных жидкостей на примере жидкого метанола (метиловый спирт CH_3OH) и воды. При этом молекулярные параметры потенциала Штокмайера $(d_a, d_b, \frac{\varepsilon}{k}, \sigma)$ взяты из [161, 166], а соответствующие экспериментальные значения плотности ρ и температуры T для метилового спирта из [156], а для воды из [6, 13, 157, 158].

Результаты расчетов приведены на рис. 3.6-3.20.

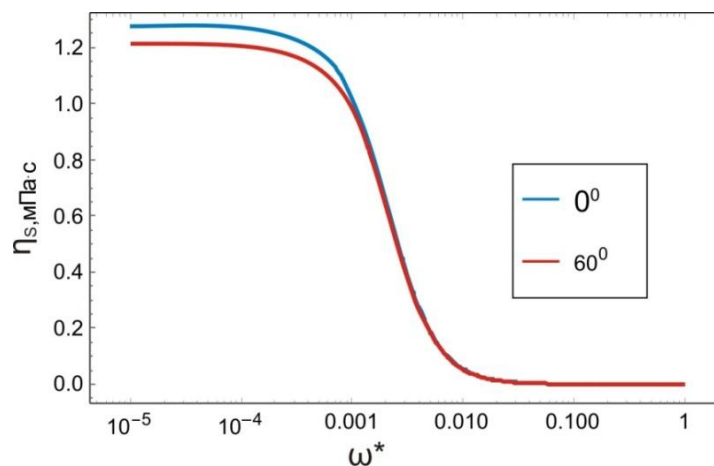


Рис.3.6. Частотная зависимость коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_s(\omega)$ воды для двух углов $\theta_1=0^\circ$ и $\theta_1=60^\circ$ при фиксированных значениях $\theta_2=0^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и температуры $t=15^\circ\text{C}$ согласно формуле (3.22).

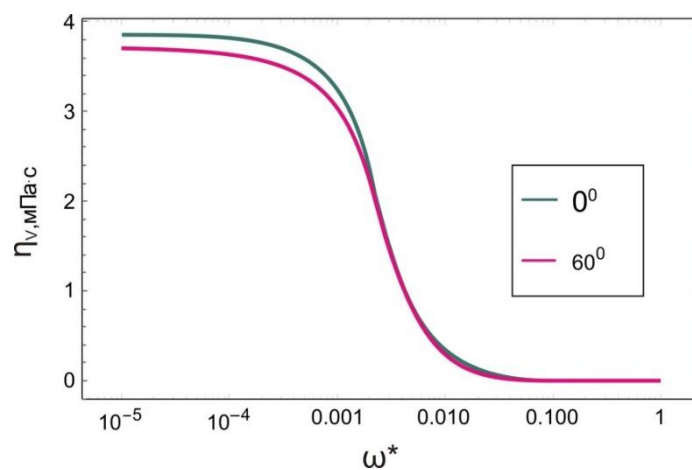


Рис.3.7. Частотная зависимость коэффициента объёмной вязкости $\eta_v(\omega)$ воды для двух углов $\theta_1=0^\circ$ и $\theta_1=60^\circ$, при фиксированной значении $\theta_2=0^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и температуры $t=15^\circ\text{C}$ согласно формуле (3.23).

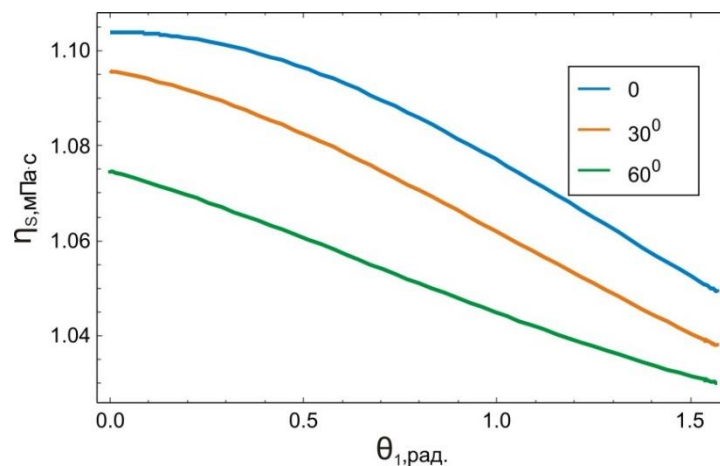


Рис. 3.8. Зависимость коэффициента сдвигового вязкости $\eta_s(\omega)$ воды от угла θ_1 , при углах $\theta_2=0^\circ$, $\theta_2=30^\circ$, $\theta_2=60^\circ$ и фиксированных значениях $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и температуры $t=15^\circ\text{C}$ согласно формуле (3.22).

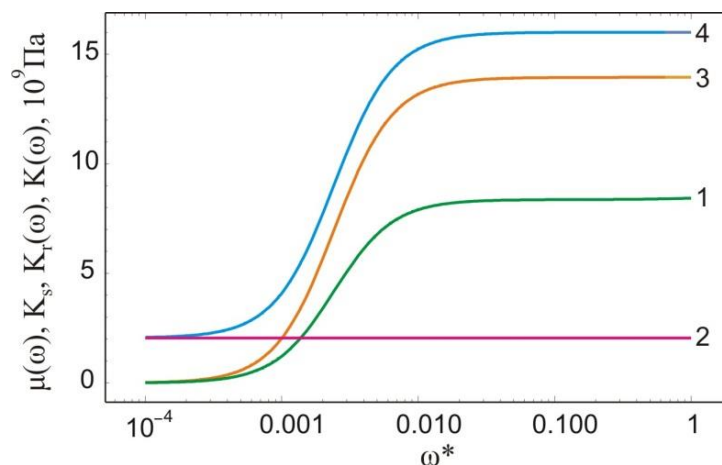


Рис. 3.9. Зависимость изотермических динамических модулей упругости $\mu(\nu) - 1$, $K_s - 2$, $K_r(\nu) - 3$, $K(\nu) - 4$ от приведенной частоты ω^* при температуре $t=15^\circ\text{C}$ согласно формул (3.24)- (3.26).

На рис. 3.9 приведены зависимости изотермических динамических модулей $K(\omega)$, K_s , $K_r(\omega)$, и $\mu(\omega)$ упругости от приведенной частоты при $t=15^\circ\text{C}$ согласно формул (3.24)- (3.26). Видно, что с ростом частоты эти

модули монотонно растут и при высоких частотах стремятся к постоянному значению.

На рис. 3.10 представлены зависимости сдвиговой $\mu(\omega)$ и релаксационной объёмной $K_r(\omega)$ модулей упругости воды от угла θ_1 при углах $\theta_2=0^\circ$, $\theta_2=30^\circ$, $\theta_2=60^\circ$ и фиксированном значении $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и температуре $t=15^\circ\text{C}$ согласно формулам (3.24) и (3.25).

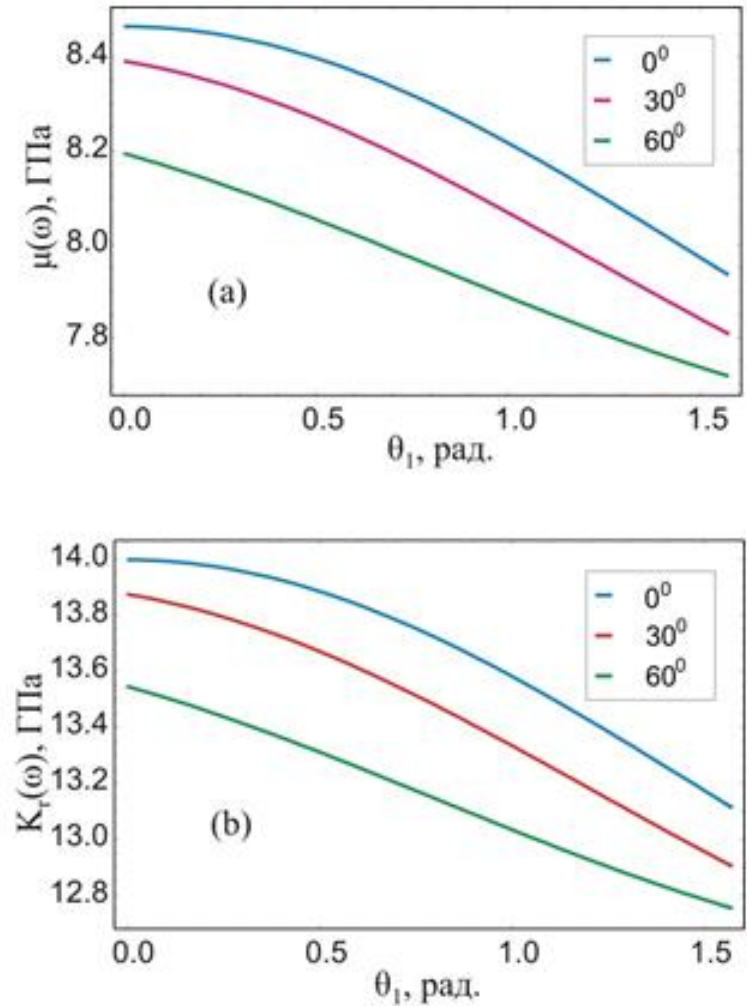


Рис. 3.10. Зависимость сдвиговой $\mu(\omega)$ (a) и релаксационной объёмной $K_r(\omega)$ (b) модулей упругости воды от угла θ_1 , при различных значениях углов $\theta_2=0^\circ$, $\theta_2=30^\circ$, $\theta_2=60^\circ$ и фиксированном значении $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и температуре $t=15^\circ\text{C}$.

Согласно численным расчетам (рис. 3.5, 3.6 и 3.9), области частотной дисперсии коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объёмной $\eta_v(\omega)$ вязкостей модулей объёмной $K(\omega)$ релаксационной $K_r(\omega)$ и сдвиговой $\mu(\omega)$ упругостей

воды являются узкими ($\sim 10^2$ Гц) и обусловлены законом затухания релаксирующих потоков по экспоненциальному закону, что соответствует общей релаксационной теории [113,114].

На рис. 3.11 *a* и *b* приведены частотные зависимости коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей метанола при температурах $t=10^\circ\text{C}$ (линии 1,3), $t=40^\circ\text{C}$ (линии 2,4) и соответствующих им плотностях при фиксированных $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$.

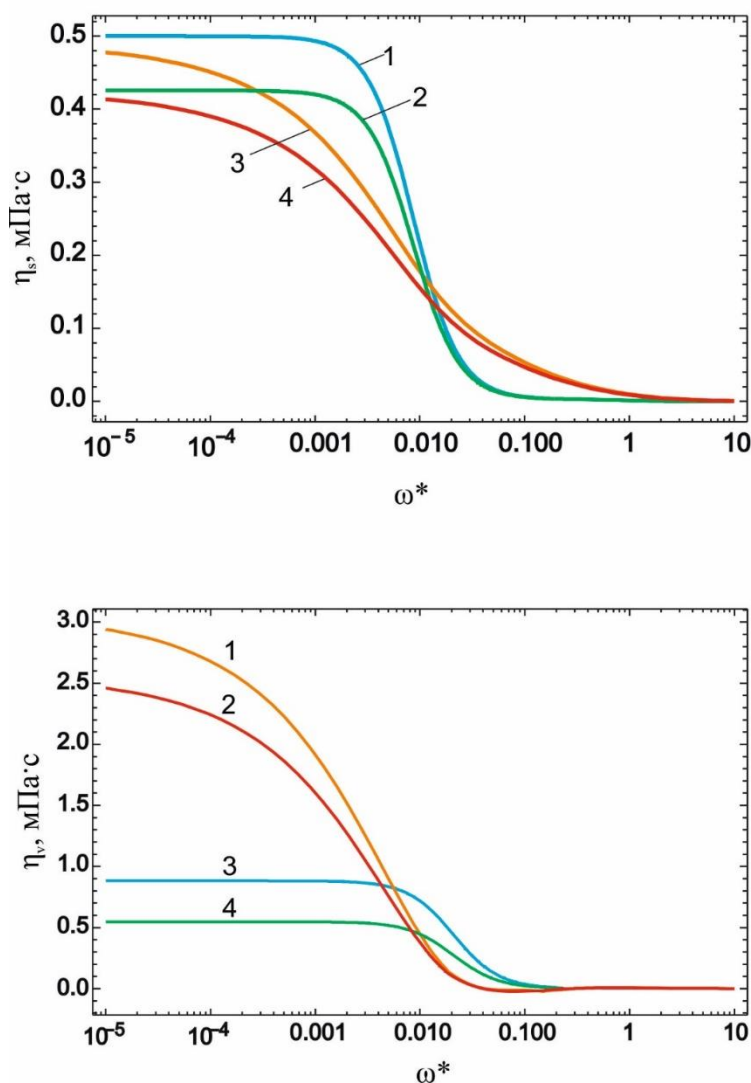


Рис. 3.11. Частотные зависимости коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей метанола при температурах $t=10^\circ\text{C}$ (линии 1,3), $t=40^\circ\text{C}$ (линии 2,4) и соответствующих им плотностях при фиксированных $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$: *a*) -линии 1,2 по формуле (3.22) и линии 3,4 по формуле (3.17); *б*) -линии 1,2 по формуле (3.18) и линии 3,4 по формуле (3.23).

Согласно рис. 3.11, области частотной дисперсии коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_V(\omega)$ вязкостей метанола на основе формул (3.22), (3.23) являются узкими (кривые 1 и 2) т.е. $\sim 10^2$ Гц и обусловлены законом затухания релаксирующих потоков по экспоненциальному закону, что соответствует общей релаксационной теории [113,114]. Область частотной дисперсии $\eta_s(\omega)$ и $\eta_V(\omega)$ на основе формул (3.17), (3.18) являются широкими (кривые 3 и 4), т.е. $\sim 10^5$ Гц и в них учитываются вклады структурной релаксации диффузионного характера.

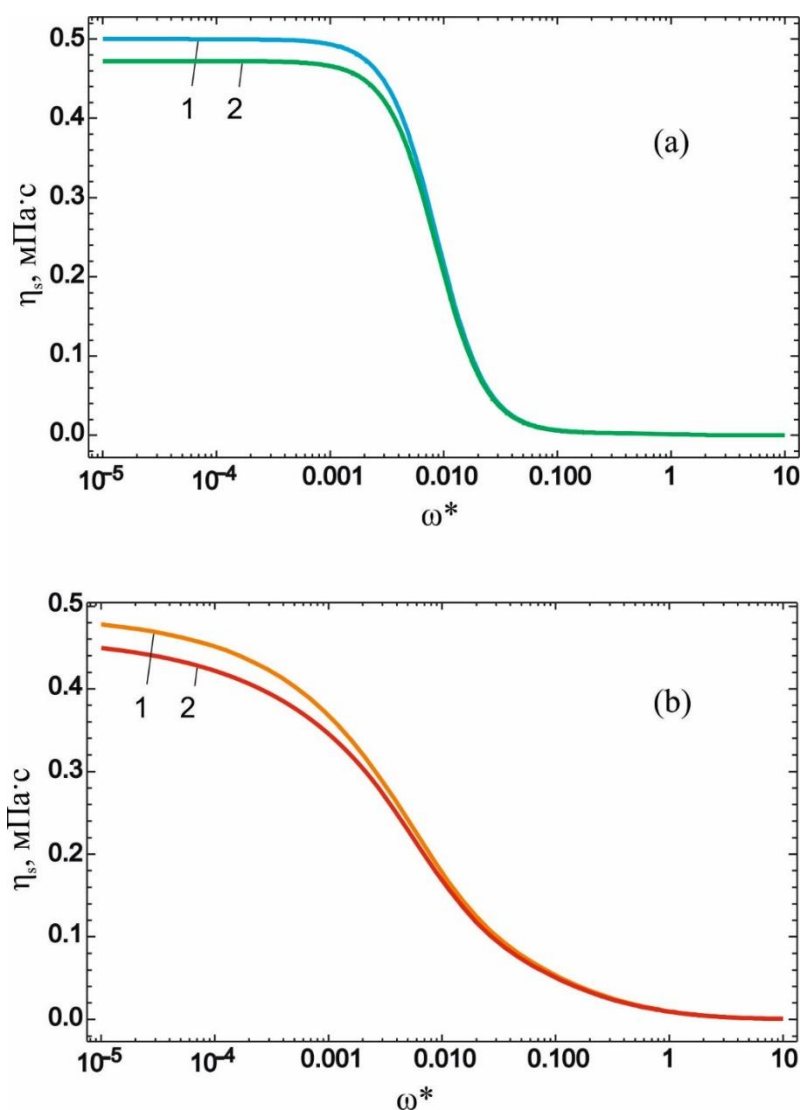


Рис. 3.12. Частотные зависимости коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ вязкости метанола для двух углов: линии 1 при $\theta_1=30^\circ$ и линии 2 при $\theta_1=60^\circ$ при фиксированных $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и температуре $t=10^\circ\text{C}$. по формулам (3.22) (a) и (3.17) (b).

На рис. 3.12 *a* и *b* представлены частотные зависимости коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ вязкости метанола для двух углов: линии 1 при $\theta_1=30^\circ$ и линии 2 при $\theta_1=60^\circ$ при фиксированных $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и температуре $t=10^\circ\text{C}$. по формулам (3.22) (*a*) и (3.17) (*b*). Видно, что с увеличением угла θ_1 $\eta_s(\omega)$ уменьшается.

На рис. 3.13 *a* и *b* показана зависимость коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_s(\omega)$ метанола от углов θ_1 и θ_2 при фиксированном значении $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и

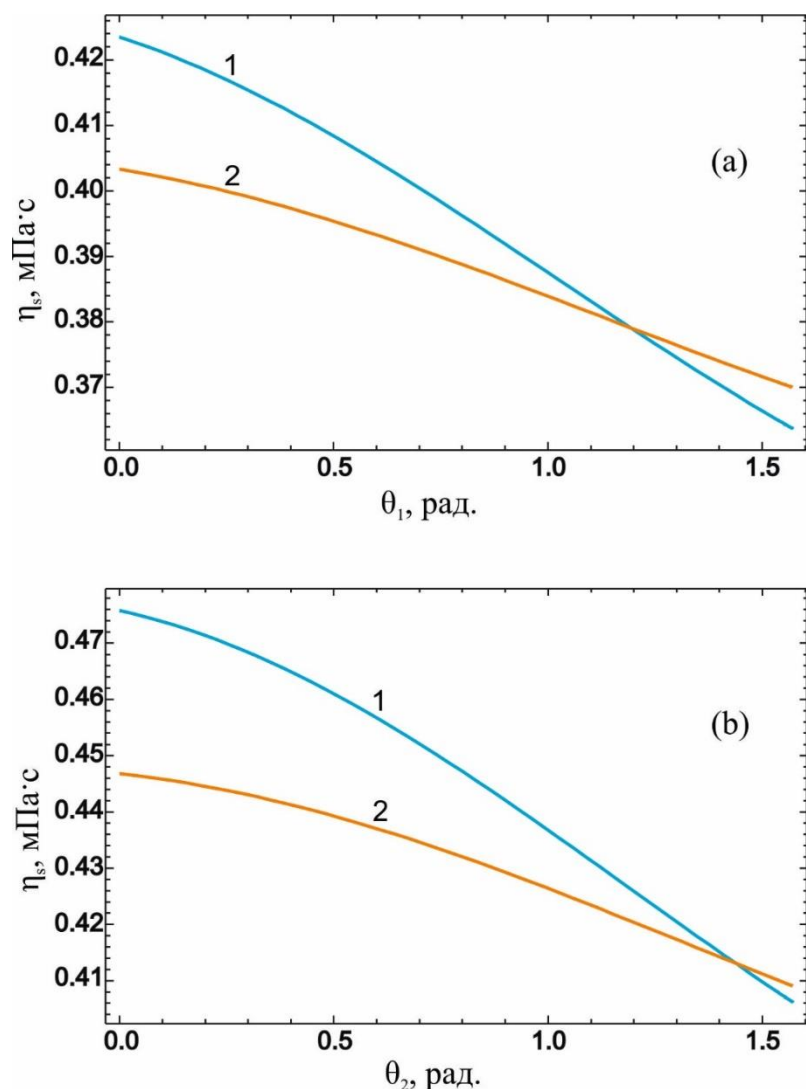


Рис.3.13. Зависимость коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_s(\omega)$ метанола от углов θ_1 и θ_2 при фиксированном значении $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и температуре $t=20^\circ\text{C}$: линии 1 по формуле (3.22) и линии 2 по формуле (3.17).

Из рисунков видно, что $\eta_s(\omega)$ по разному зависит от закона затухания релаксирующих потоков, что обусловлено учётом вкладов релаксационных процессов.

На рис. 3.14 *a* и *b* приведены зависимости сдвигового $\mu(\omega)$ и объемного $K(\omega)$ модулей упругости метанола от частоты при температурах $t=30^\circ\text{C}$ (линии 2,4), $t=50^\circ\text{C}$ (линии 1,3) и соответствующих им плотностях при фиксированных $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$.

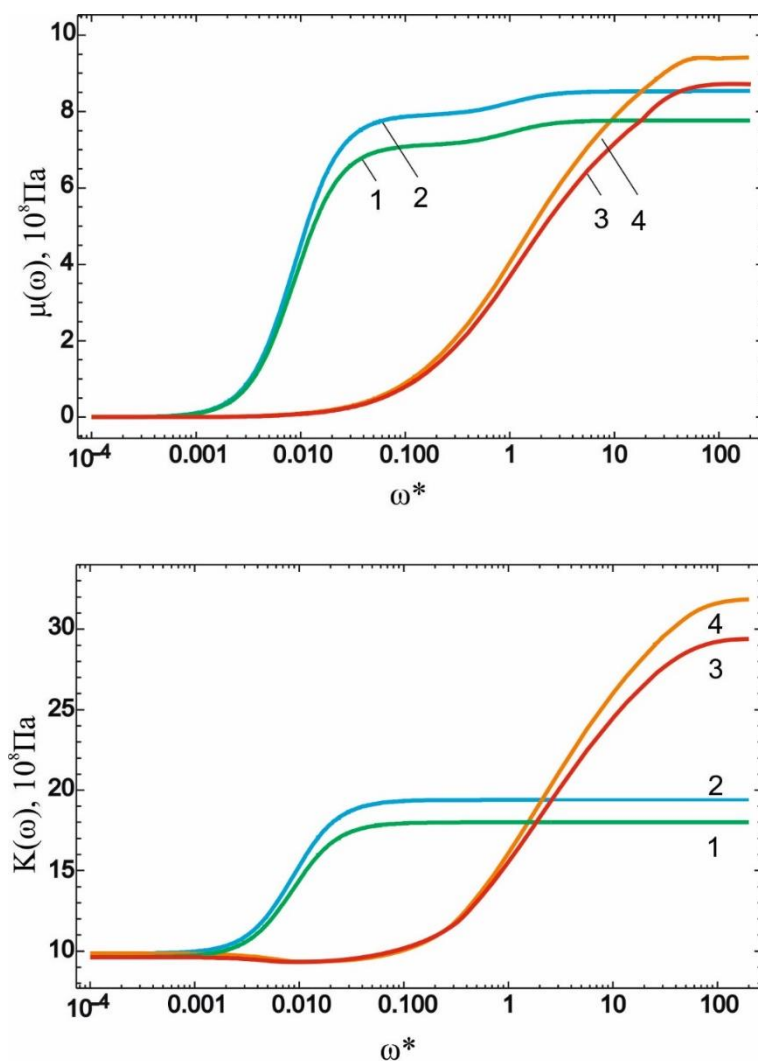


Рис. 3.14. Зависимости сдвигового $\mu(\omega)$ и объемного $K(\omega)$ модулей упругости метанола от частоты при $t=30^\circ\text{C}$ (линии 2,4), $t=50^\circ\text{C}$ (линии 1,3) и соответствующих им плотностях при фиксированных $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$: линии 1,2 по формулам (3.24) и (3.25), линии 3,4 по формулам (3.19) и (3.20), соответственно.

Согласно рис 3.14 *a* и *b*, области частотной дисперсии модулей сдвиговой $\mu(\omega)$ и объёмной $K(\omega)$ упругостей метанола при температурах $t=30^\circ\text{C}$ и $t=50^\circ\text{C}$ при фиксированных значениях $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ на основе формул (3.19) и (3.20) являются широкими (кривые 3 и 4), т.е. $\sim 10^5$ Гц, а на основе формул (3.24) и (3.25) являются узкими (кривые 1 и 2), т.е. $\sim 10^2$ Гц, что соответствует общей релаксационной теории [113,114].

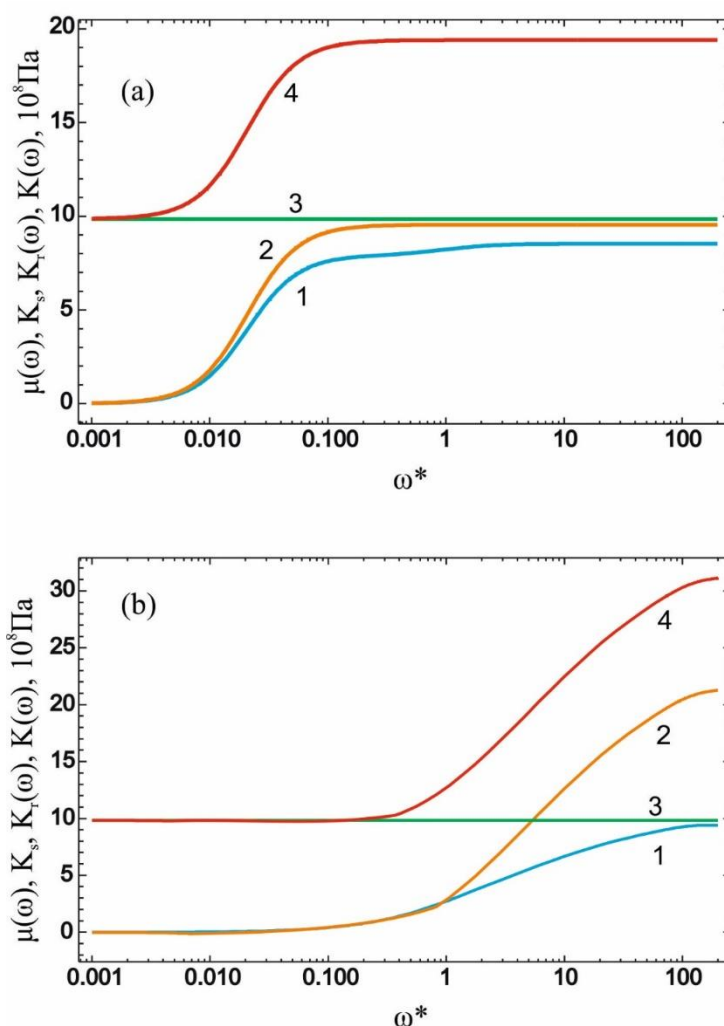


Рис. 3.15. Зависимость изотермических динамических модулей упругости $\mu(\nu) - 1$, $K_r(\nu) - 2$, $K_s - 3$, $K(\nu) - 4$ от приведенной частоты ω^* при температуре $t=30^\circ\text{C}$ и соответствующих им плотностях при фиксированных $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$: (a) - по формулам (3.24)-(3.26); (b) - по формулам (3.17)-(3.21).

На рис. 3.15 приведены зависимости изотермических динамических модулей упругости $\mu(\omega)$, $K_r(\omega)$, K_s и $K(\omega)$ от приведенной частоты при $t=30^\circ\text{C}$ и фиксированных значений $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$. Видно, что с

ростом частоты эти модули монотонно растут и при высоких частотах стремятся к постоянному значению. Следовательно, область частотной дисперсии вязкоупругих свойств полярных жидкостей тесно связана с природой восстановления равновесной структуры и сложными взаимодействиями между молекулами, а также влиянием различных факторов, таких, как размерные эффекты, ориентация молекул и др.

Для количественного сравнения результатов численных расчетов с экспериментальными данными в табл. 3.4 и 3.5 приведены теоретические значения коэффициентов сдвиговой вязкости $\eta_s(\omega)$ и объемной вязкости $\eta_v(\omega)$ в зависимости от температуры и плотности, вычисленные по формулам (3.17), (3.18), (3.22), (3.23) при частоте $\omega^* = 10^{-5}$ и фиксированных значениях углов $\theta_1 = \pi/6$, $\theta_2 = \pi/3$, $\xi_1 - \xi_2 = 0$ для метилового спирта и воды. Из таблиц следует, что полученные теоретические результаты находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными.

Таблица 3.4

Изочастотные зависимости коэффициентов сдвиговой и объемной вязкостей от температуры и плотности для метилового спирта

$$(\omega^* = 10^{-5}, \theta_1 = \pi/6, \theta_2 = \pi/3, \xi_1 - \xi_2 = 0).$$

t, °C [156]	ρ , кг/м ³ [156]	η_s , мПа · с			η_v , мПа · с		η_v/η_s	
			форм. (3.22)	форм. (3.17)	форм. (3.23)	форм. (3.18)	фор.(3.23)/ фор.(3.22)	фор.(3.18)/ фор.(3.17)
10	801,0	-	0,4989	0,4831	3,8953	3,7893	7,8080	7,8437
20	791,5	0,5780	0,4513	0,4394	3,4002	3,2909	7,5337	7,4893
30	782,5	0,5090	0,4104	0,4021	2,9837	2,8775	7,2707	7,1564
40	774,0	0,4460	0,3749	0,3700	2,6315	2,5322	7,0187	6,8436
50	765,0	0,3930	0,3431	0,3412	2,3233	2,2326	6,7713	6,5443
60	755,5	0,3470	0,3144	0,3150	2,0527	1,9714	6,5283	6,2581
70	746,0	0,3060	0,2889	0,2917	1,8177	1,7462	6,2929	5,9865
80	735,5	0,2710	0,2652	0,2699	1,6066	1,5446	6,0586	5,7239
90	725,0	0,2400	0,2439	0,2502	1,4225	1,3698	5,8317	5,4746

Таблица 3.5

Изочастотные зависимости коэффициентов сдвиговой и
объемной вязкости от температуры и плотности для воды

$(\omega^* = 10^{-5}, \theta_1 = \pi/6, \theta_2 = \pi/3, \xi_1 - \xi_2 = 0).$

t, °C	ρ , кг/м ³	η_s , мПа · с				η_V , мПа · с			η_V/η_s		
			форм.	форм.			форм.	форм.		фор.(3.23)/	фор.(3.18)/
[13]	[13]	[13]	(3.22)	(3.17)		[13]	(3.23)	(3.18)	[13]	фор.(3.22)	фор.(3.17)
7	999,99	1,4300	0,7499	1,4737		4,5000	2,0980	3,4105	3,1469	2,7978	2,3143
10	999,73	1,3100	0,7404	1,4605		4,0300	1,9984	3,3267	3,0763	2,6992	2,2779
15	999,13	1,1400	0,7248	1,4384		3,3800	1,8428	3,1922	2,9649	2,5425	2,2193
25	997,07	0,8880	0,6939	1,3926		2,4700	1,5666	2,9390	2,7815	2,2577	2,1105
40	992,20	0,6530	0,6488	1,3217		1,8400	1,2281	2,5972	2,8178	1,8929	1,9651
50	988,00	0,5470	0,6199	1,2740		1,4800	1,0444	2,3932	2,7057	1,6849	1,8785

Продолжения таблица 3.5

t, °C	ρ , кг/м ³	η_s , мПа · с				η_V , мПа · с			η_V/η_s		
			форм.	форм.			форм.	форм.		фор.(3.23)/	фор.(3.18)/
[157]	[157]	[157]	(3.22)	(3.17)		[156]	(3.23)	(3.18)	[157]	фор.(3.22)	фор.(3.17)
0	999,87	1,7865	0,7715	1,5020		5,610	2,3494	3,6110	3,1402	3,0451	2,4041
5	999,99	1,5177	0,7560	1,4817		4,550	2,1670	3,4663	2,9980	2,8665	2,3394
10	999,73	1,3061	0,7404	1,4605		3,750	1,9984	3,3267	2,8711	2,6992	2,2779
15	999,13	1,1381	0,7248	1,4384			1,8428	3,1922		2,5425	2,2193
20	998,23	1,0020	0,7093	1,4157		2,840	1,6991	3,0629	2,8343	2,3956	2,1636
25	997,07	0,8903	0,6939	1,3926			1,5666	2,9390		2,2577	2,1105
30	995,68	0,7976	0,6787	1,3692		2,270	1,4444	2,8203	2,8460	2,1282	2,0598
40	992,40	0,6531	0,6492	1,3226		1,810	1,2278	2,5989	2,7714	1,8912	1,9650
50	988,00	0,5471	0,6199	1,2740			1,0444	2,3932		1,6849	1,8785
60	983,20	0,4666	0,5920	1,2267		1,470	0,8885	2,2068	3,1505	1,5009	1,7989
80	971,80	0,3547	0,5390	1,1331		1,220	0,6443	1,8788	3,4395	1,1955	1,6581
90	965,30	0,3148	0,5139	1,0871			0,5495	1,7346		1,0693	1,5955
100	958,30	0,2822	0,4896	1,0418			0,4692	1,6018		0,9582	1,5375

t, °C	ρ , кг/м ³	η_s , мПа · с				η_v , мПа · с			η_v/η_s		
			форм.	форм.			форм.	форм.		фор.(3.23)/	фор.(3.18)/
[6]	[158]	[6]	(3.22)	(3.17)		[6]	(3.23)	(3.18)	[6]	фор.(3.22)	фор.(3.17)
5	999,99	1,5141	0,7560	1,4817		7,8386	2,1670	3,4663	5,1771	2,8665	2,3394
10	999,73	1,3028	0,7404	1,4605		4,7152	1,9984	3,3267	3,6193	2,6992	2,2779
15	999,13	1,1362	0,7248	1,4384		3,4811	1,8428	3,1922	3,0638	2,5425	2,2193
20	998,23	1,0018	0,7093	1,4157		2,7529	1,6991	3,0629	2,7480	2,3956	2,1636
25	997,07	0,8917	0,6939	1,3926		2,4535	1,5666	2,9390	2,7515	2,2577	2,1105
30	995,68	0,8002	0,6787	1,3692		2,3110	1,4444	2,8203	2,8880	2,1282	2,0598
35	994,06	0,7232	0,6637	1,3456		2,2332	1,3318	2,7065	3,0879	2,0067	2,0114
40	992,20	0,6577	0,6488	1,3217		2,1237	1,2281	2,5972	3,2290	1,8929	1,9651

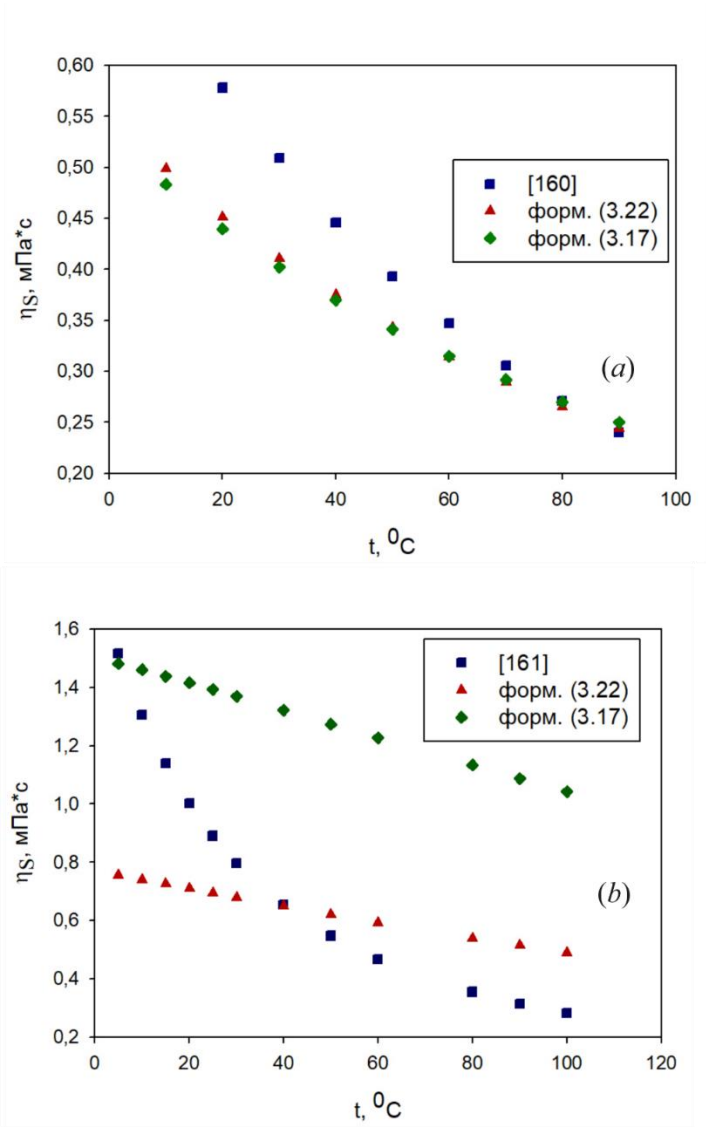


Рис. 3.16. Зависимости коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_s(\omega)$ метанола и воды от температуры при $\omega^* = 10^{-5}$, $\theta_1 = \pi/6$, $\theta_2 = \pi/3$, $\xi_1 - \xi_2 = 0$.

Также на рис. 3.16 показаны зависимости коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_s(\omega)$ метанола от температуры при $\omega^* = 10^{-5}$, $\theta_1 = \pi/6$, $\theta_2 = \pi/3$, $\xi_1 - \xi_2 = 0$.

Представленные температурные зависимости находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

На рис.3.17 представлены зависимости модуля сдвиговой упругости $\mu(\omega)$ от частоты внешнего возмущения и относительной ориентации молекул (диполь) при фиксированных значениях $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и температуре $t=10^\circ\text{C}$ для метилового спирта и воды.-

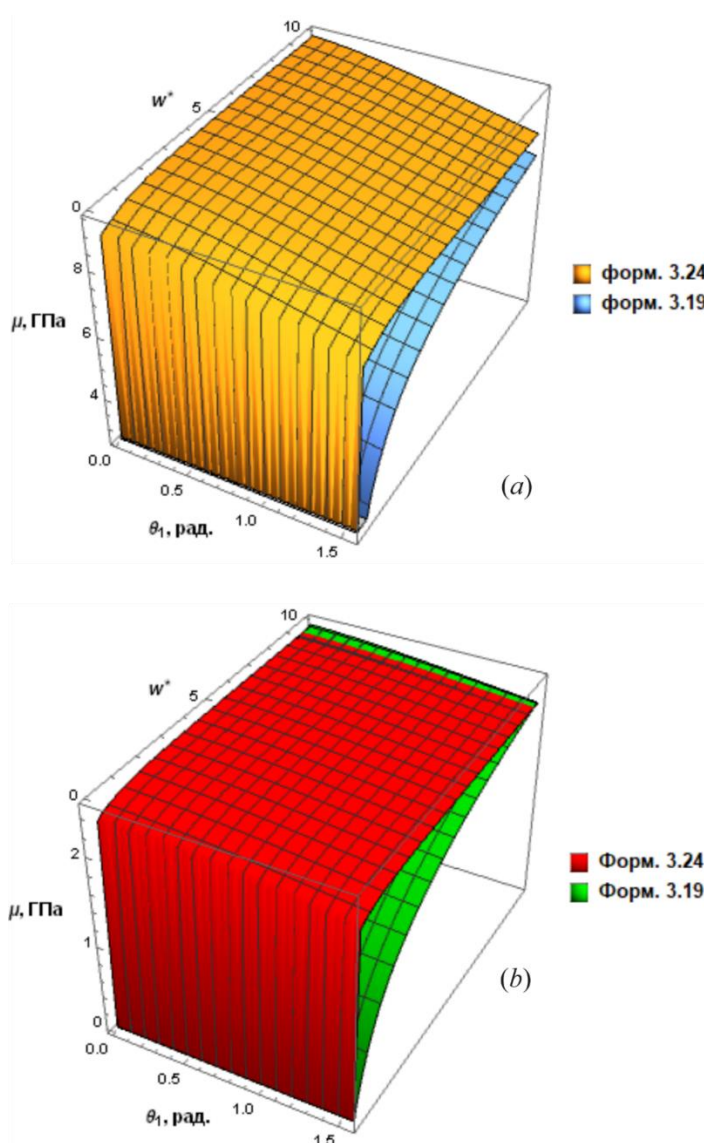


Рис. 3.17. Зависимость изотермических динамических модулей упругости $\mu(\omega)$ от приведенной частоты ω^* при фиксированных значениях $\theta_2=30^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$: (a)- для метилового спирта при температуре $t=20^\circ\text{C}$; (b)- для воды при температуре $t=15^\circ\text{C}$.

Видно, что с увлечением угла θ_1 $\mu(\omega)$ уменьшается. Область частотной дисперсии $\mu(\omega)$, основанная на формуле (3.19), является широкой, а по формуле (3.24)- узкой, что соответствует результатам общей релаксационной теории жидкостей.

На рис. 3.18-3.22 показаны зависимости коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей, а также релаксационного модуля упругости $K_r(\omega)$ для метилового спирта и воды от углов θ_1 , θ_2 и $\theta_3=\xi_1-\xi_2$.

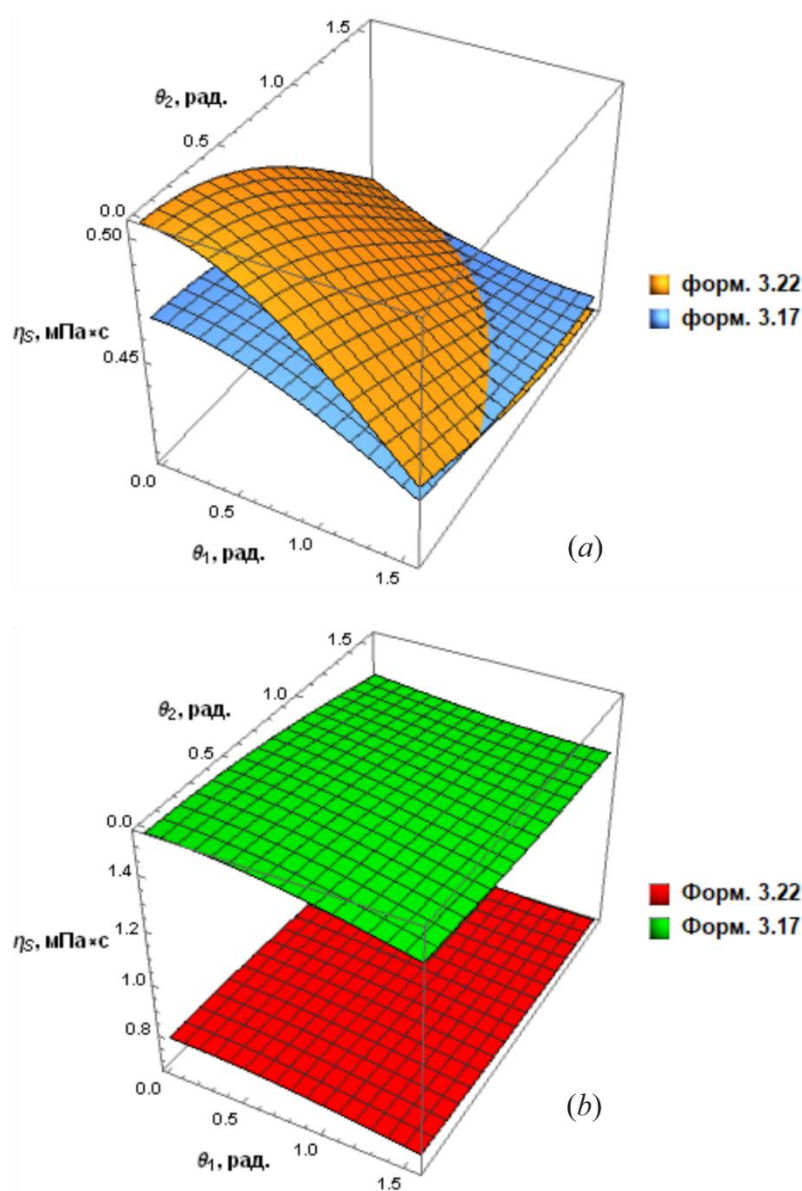


Рис. 3.18. Зависимость коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_s(\omega)$ от углов θ_1 и θ_2 , при фиксированных значениях $\xi_1-\xi_2=0$: (a)- для метилового спирта при температуре $t=20$ °C; (b)- для воды при температуре $t=15$ °C.

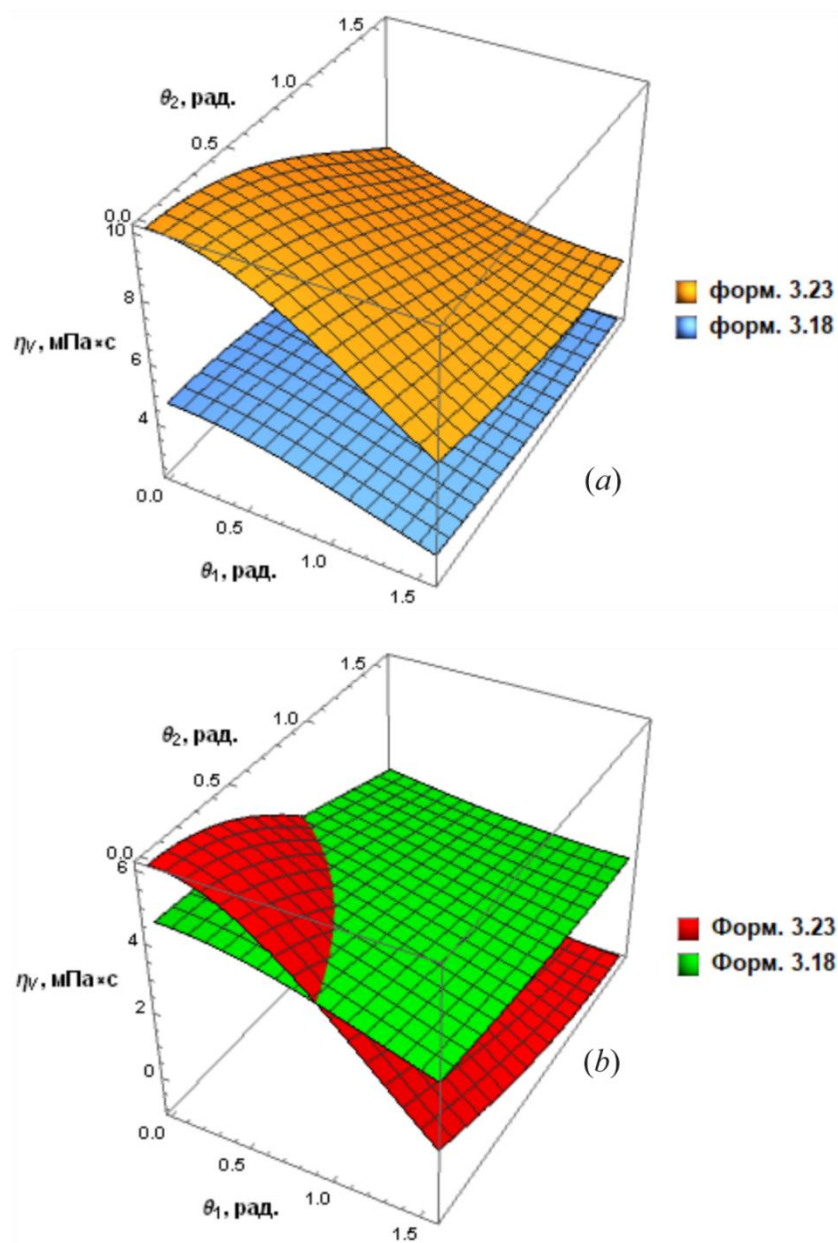


Рис. 3.19. Зависимость коэффициента объемной вязкости $\eta_V(\omega)$ от углов θ_1 и θ_2 , при фиксированных значениях $\xi_1-\xi_2=0$: (a)- для метилового спирта при температуре $t=20^\circ\text{C}$; (b)- для воды при температуре $t=15^\circ\text{C}$.

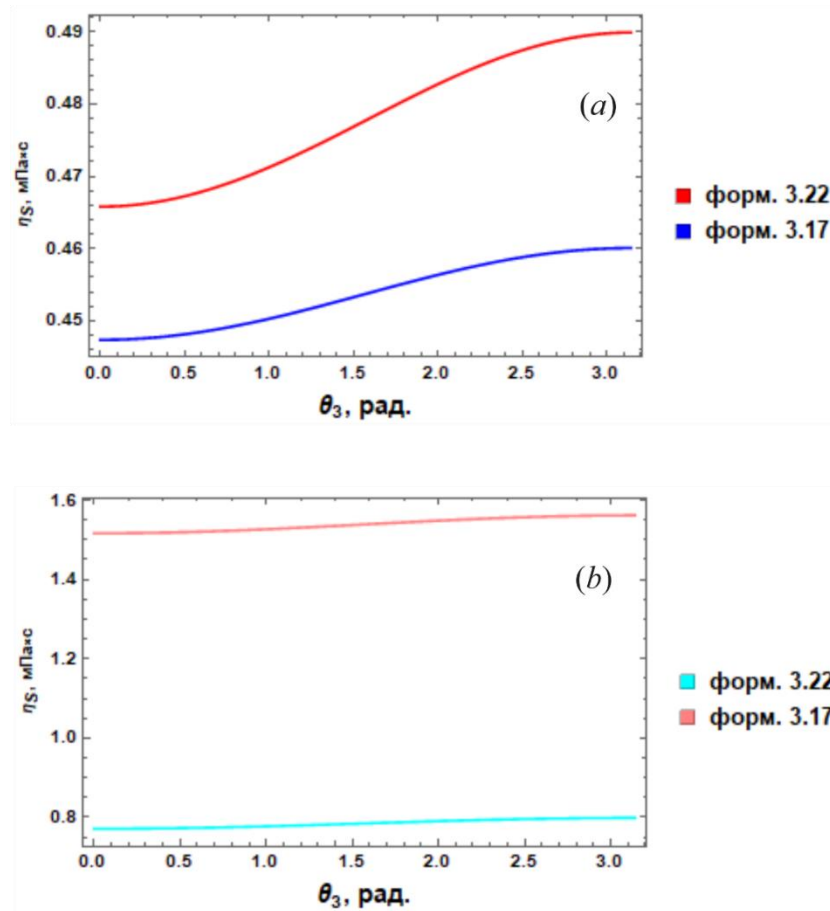


Рис. 3.20. Зависимость $\eta_s(\omega)$ от углов $\theta_3=\xi_1-\xi_2$ при фиксированных значениях $\theta_1= \pi/6$ и $\theta_2= \pi/4$: (a)- для метилового спирта при температуре $t=20\text{ }^{\circ}\text{C}$; (b)- для воды при температуре $t=10\text{ }^{\circ}\text{C}$.

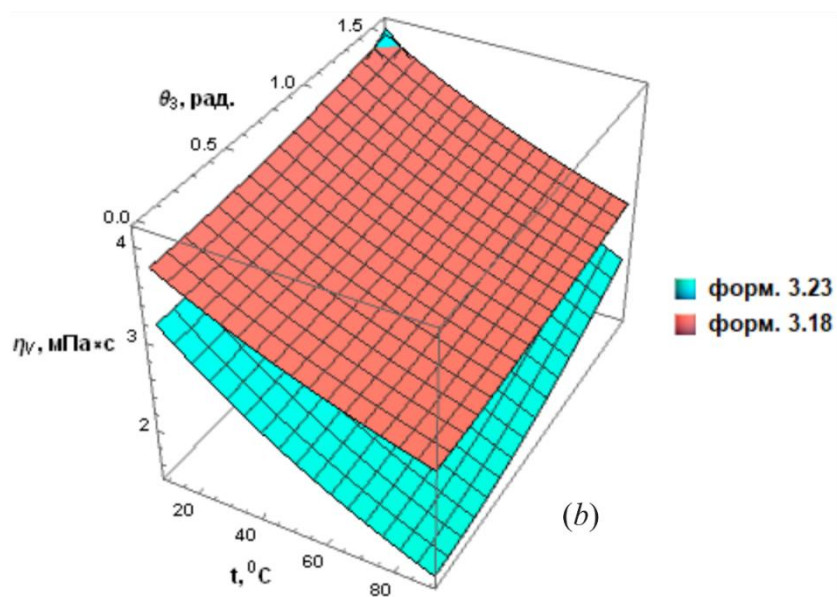
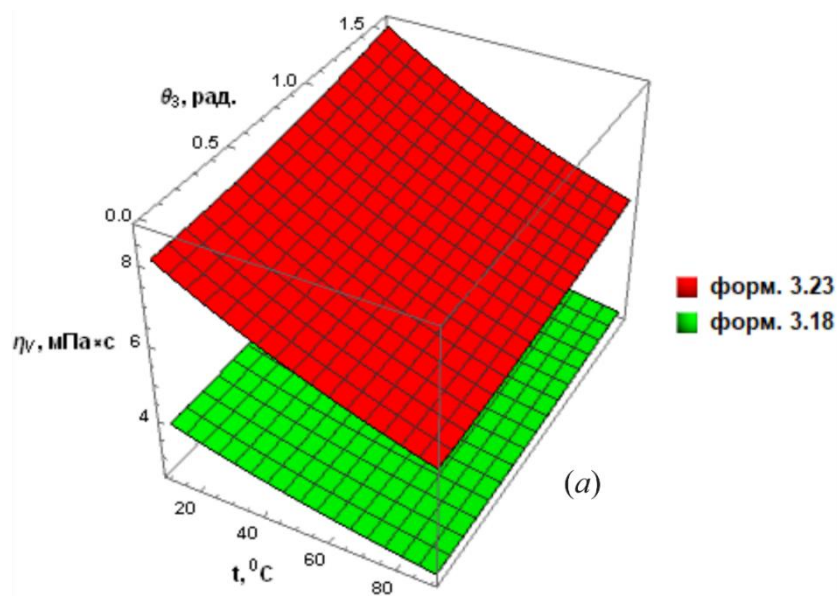


Рис. 3.21. Зависимость $\eta_v(\omega)$ от угол $\theta_3=\xi_1-\xi_2$ и температуры при фиксированных значениях частоты $\omega\tau = \omega^* = 10^{-5}$, $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$: (a)- для метилового спирта при температуре $t=20$ °C; (b)- для воды при температуре $t=10$ °C.

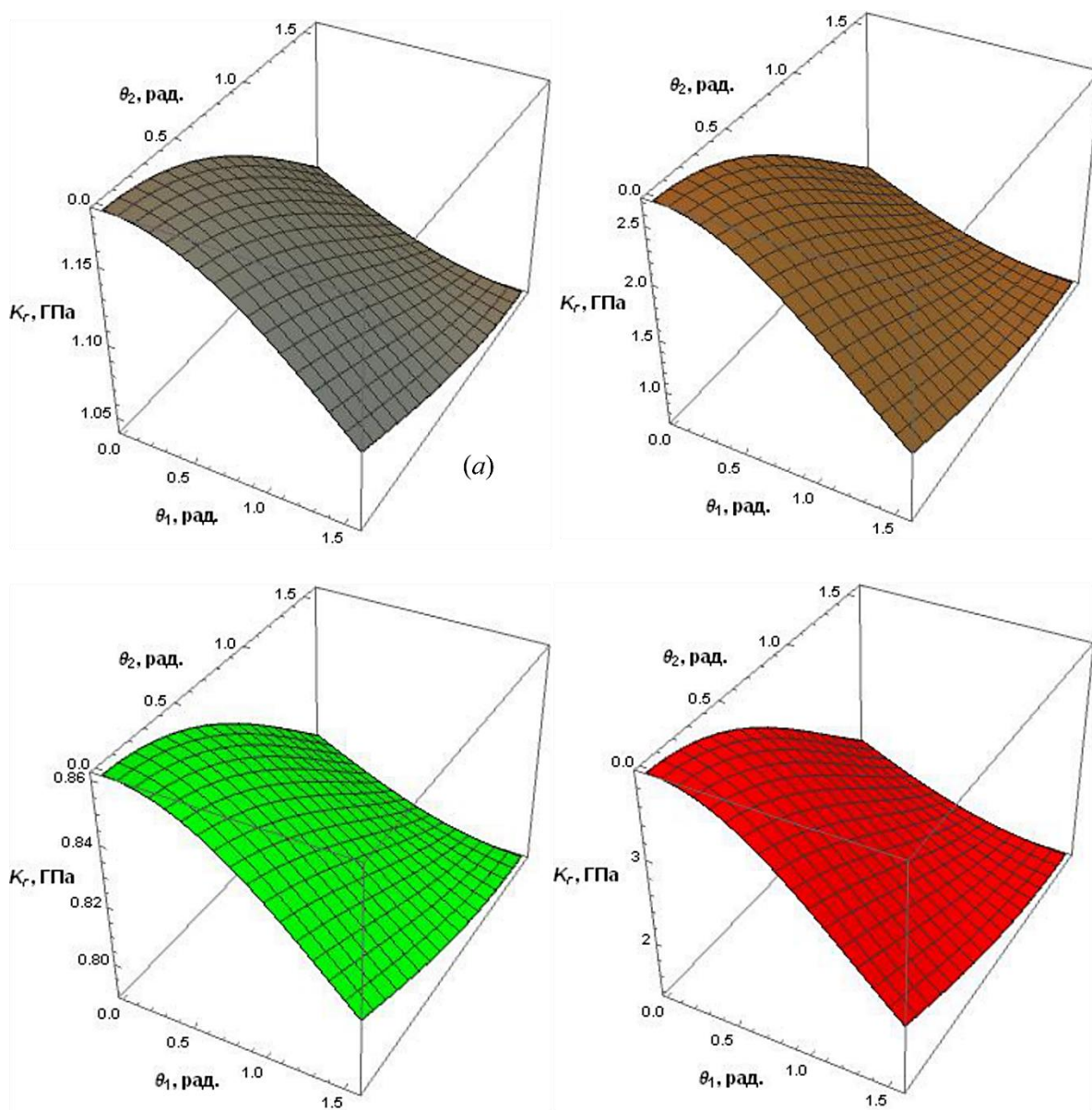


Рис. 3.22. Зависимость релаксационного модуля упругости $K_r(\omega)$ от углов θ_1 и θ_2 , при фиксированных значениях $\xi_1-\xi_2=0$: (a)- для метилового спирта при температуре $t=20\text{ }^{\circ}\text{C}$ по формуле (3.20); (b)- для метилового спирта при температуре $t=20\text{ }^{\circ}\text{C}$ по формуле (3.25); (c)- для воды при температуре $t=15\text{ }^{\circ}\text{C}$ по формуле (3.20); (d)- для воды при температуре $t=15\text{ }^{\circ}\text{C}$ по формуле (3.25).

Из рис. 3.18-3.22 видно, что $\eta_s(\omega)$, $\eta_s(\omega)$ и $K_r(\omega)$ зависят от закона затухания релаксирующих потоков по-разному, что обусловлено учётом вкладов релаксационных процессов в эти величины. Следовательно, вязкоупругие свойства полярных жидкостей тесно связаны с природой восстановления равновесной структуры и сложными взаимодействиями

между молекулами, а также с влиянием различных факторов, таких как размерные эффекты и ориентация молекул.

Заключение к главе 3

На основе динамических выражений для вязкости и модулей упругости произведён численный расчет для моделей многоатомных жидкостей с квазисферическими и полярными молекулами. Применены потенциалы Леннард-Джонса и Штокмайера. Расчеты выполнены при заданных экспериментальных параметрах и сопоставлены с известными данными.

ГЛАВА IV. АКУСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МНОГОАТОМНЫХ И ПОЛЯРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

4.1. Исследование акустических свойств полярных жидкостей в зависимости от частоты и термодинамических параметров состояния

Исследование акустических свойств многоатомных и полярных жидкостей, таких как скорость звука и коэффициенты поглощения, позволяет более точно оценить их молекулярную структуру и динамику, а также выявить особенности межмолекулярных взаимодействий. Важным аспектом является уяснение особенностей влияния полярности молекул и их многоатомной структуры на акустические параметры, что способствует более глубокому осмыслению механизмов релаксационных процессов, явлений переноса и структурных изменений в жидких средах. Кроме того, исследование акустических свойств этих жидкостей имеет прямое практическое приложение в таких областях, как диагностика, сенсорика и разработка новых материалов и технологий, основанных на акустических методах контроля и воздействия. Современные методы молекулярной акустики, включая термодинамические и кинетические подходы, открывают новые возможности для разработки жидкостей с улучшенными эксплуатационными характеристиками. Таким образом, изучение акустических свойств многоатомных и полярных жидкостей представляет собой важную задачу, имеющую не только фундаментальное значение для физики и химии, но и широкое практическое применение.

На сегодняшний день существует множество экспериментальных и теоретических исследований, посвящённых акустическим свойствам жидкостей. При этом особое внимание уделяется влиянию релаксационных процессов на коэффициенты переноса и модули упругости, которые определяют акустические характеристики.

Подробный обзор результатов исследований структуры, природы внутренних релаксационных процессов, явлений переноса и акустических

свойств жидкостей, полученных с использованием методов общей релаксационной теории, временных корреляционных функций, проекционных операторов, кинетических уравнений, неравновесных статистических операторов, а также с применением метода молекулярной акустики представлены в §1.1- §1.3 .

Целью данной главы является исследование зависимости акустических характеристик многоатомных и полярных жидкостей от термодинамических параметров состояния и частоты, с учётом природы рассасывания необратимых потоков, когда релаксирующие потоки затухают по степенному или экспоненциальному законам.

В [5-А,12-А,13-А] методом кинетических уравнений для скорости $C(\omega)$ и коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ звуковых волн получены следующие аналитические выражения:

$$C(\omega) = C_s \left\{ 1 + \frac{1}{2\rho C_0^2} \left[\frac{4}{3} \mu(\omega) + K_r(\omega) \right] \right\}, \quad (4.1)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega^2}{2\rho C_s^3} \left[\frac{4}{3} \eta_s(\omega) + \eta_v(\omega) \right], \quad (4.2)$$

где $C_s = \sqrt{\frac{K_s}{\rho}}$ - адиабатическая скорость звука, ρ - плотность раствора, $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$,

$K_r(\omega) = K(\omega) - K_s$, $K_s = n \left(\frac{\partial P}{\partial n} \right)_T + \frac{T}{nC_v} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_n^2$ - адиабатический объемный модуль упругости, $\mu(\omega)$ - динамический сдвиговый модуль упругости, $K(\omega)$ - динамический объемной модуль упругости, $\eta_s(\omega)$, $\eta_v(\omega)$ - коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей, соответственно.

Явный вид микроскопических выражений для динамических модулей сдвиговой $\mu(\omega)$ и объемной $K_r(\omega)$ упругостей и коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей с учетом вкладов релаксации тензора напряжения в импульсном и конфигурационном пространстве, когда релаксирующие потоки затухают по степенному закону, а механизм является диффузионным, приведен в главах 2 и 3, т.е. формулы (3.17)-(3.21) [127,144,149,150].

В случае, когда релаксирующие потоки затухают по экспоненциальному закону, явный вид выражения для динамических коэффициентов объемной $\eta_V(\omega)$ и сдвиговой $\eta_S(\omega)$ вязкостей, модулей объемной $K_r(\omega)$ и сдвиговой $\mu(\omega)$ упругостей приведен в главах 2 и 3, т.е. формулы (3.22)-(3.25) [1-А,5-А,12-А,13-А]. При этом для исследования акустических свойства полярных жидкостей, как и в случае главы 3, учитываем (2.17) -(2.25) в выражениях (4.1) и (4.2) с учетом коэффициента трения жидкостей β и радиальной функции распределения (3.12)-(3.14). Потенциал межмолекулярного взаимодействия $\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b)$ принимаем в виде потенциала Штокмайера (3.1).

Для более подробного исследования проведем численный расчет скорости $C(\omega)$ и коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ звуковых волн.

В качестве полярной жидкости, как и в случае параграфа 3 главы 3, приняты метиловый спирт CH_3OH и вода. Молекулярные параметры, входящие в потенциал Штокмайера $(d_a, d_b, \frac{\varepsilon}{k}, \sigma)$, взяты из [160,165], а соответствующие экспериментальные значения плотности ρ и температуры T для метилового спирта из [156] и для воды из [4,6,158].

Результаты численных расчетов приведены в табл. 4.1 и 4.2 и на рис. 4.1-4.3 и сравнены с экспериментальными результатами [13].

Таблица 4.1

Изочастотная зависимость коэффициента поглощения от температуры и плотности для воды ($\omega^* = 10^{-5}$, $\theta_1 = \pi/6$, $\theta_2 = \pi/6$, $\xi_1 - \xi_2 = 0$).

t, °C [13]	ρ , кг/м ³ [13]	C _s , м/с [13]	$\alpha/\omega^2 \cdot 10^{14}$, м ⁻¹ ·с ² (форм. (4.2))		
			[13]	с учетом форм. (3.22) и (3.23)	с учетом форм. (3.17) и (3.18)
7	999,99	1434,92	4,280	1,154	1,336
10	999,73	1447,29	3,760	1,092	1,277
15	999,13	1465,96	3,070	1,000	1,189
25	997,07	1496,73	2,160	0,853	1,048
40	992,20	1528,89	1,510	0,697	0,894
50	988,00	1542,57	1,210	0,620	0,818

Таблица 4.2

Изочастотная ($\omega^* = 10^{-5}$) зависимость коэффициента поглощения от температуры, плотности и угла θ_1 , при фиксированном значении $\theta_2= \pi/6$ и $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ для метилового спирта

t, °C [156]	ρ , кг/м ³ [156]	$\alpha/\omega^2 \cdot 10^{14}$, м ⁻¹ ·с ² (форм. (4.2))							
		с учетом форм. (3.22) и (3.23)				с учетом форм. (3.17) и (3.18)			
		$\theta_1 = 0$	$\theta_1 = \pi/6$	$\theta_1 = \pi/4$	$\theta_1 = \pi/3$	$\theta_1 = 0$	$\theta_1 = \pi/6$	$\theta_1 = \pi/4$	$\theta_1 = \pi/3$
10	801,0	6,700	5,898	5,316	4,696	3,392	3,039	2,782	2,506
20	791,5	5,946	5,231	4,713	4,160	2,987	2,680	2,457	2,217
30	782,5	5,303	4,663	4,199	3,704	2,648	2,380	2,184	1,974
40	774,0	4,752	4,177	3,759	3,313	2,362	2,126	1,954	1,768
50	765,0	4,267	3,748	3,372	2,969	2,114	1,905	1,753	1,589
60	755,5	3,838	3,370	3,029	2,665	1,896	1,712	1,577	1,431
70	746,0	3,462	3,037	2,729	2,399	1,708	1,544	1,424	1,294
80	735,5	3,122	2,737	2,458	2,159	1,539	1,393	1,286	1,170
90	725,0	2,821	2,472	2,219	1,947	1,391	1,261	1,165	1,062

Для количественного сравнения результатов численных расчетов с экспериментальными данными в табл. 4.1 приведены теоретические значения коэффициента поглощения α/ω^2 в зависимости от температуры и плотности, вычисленные по формулам (4.2) с учетом формул (3.17), (3.18), (3.22) и (3.23) при частоте $\omega^* = 10^{-5}$ и фиксированных значениях углов $\theta_1 = \pi/6$, $\theta_2 = \pi/6$, $\xi_1 - \xi_2 = 0^\circ$ для воды. Из таблицы следует, что полученные теоретические результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными.

На рис. 4.1. показаны зависимости изочастотного коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 для метилового спирта и воды от углов θ_1 и θ_2 при фиксированном значении $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и постоянной температуре. Из рисунка видно, что коэффициент поглощения звука зависит от закона затухания релаксирующих потоков по-разному, что обусловлено учётом вкладов релаксационных процессов в эти величины.

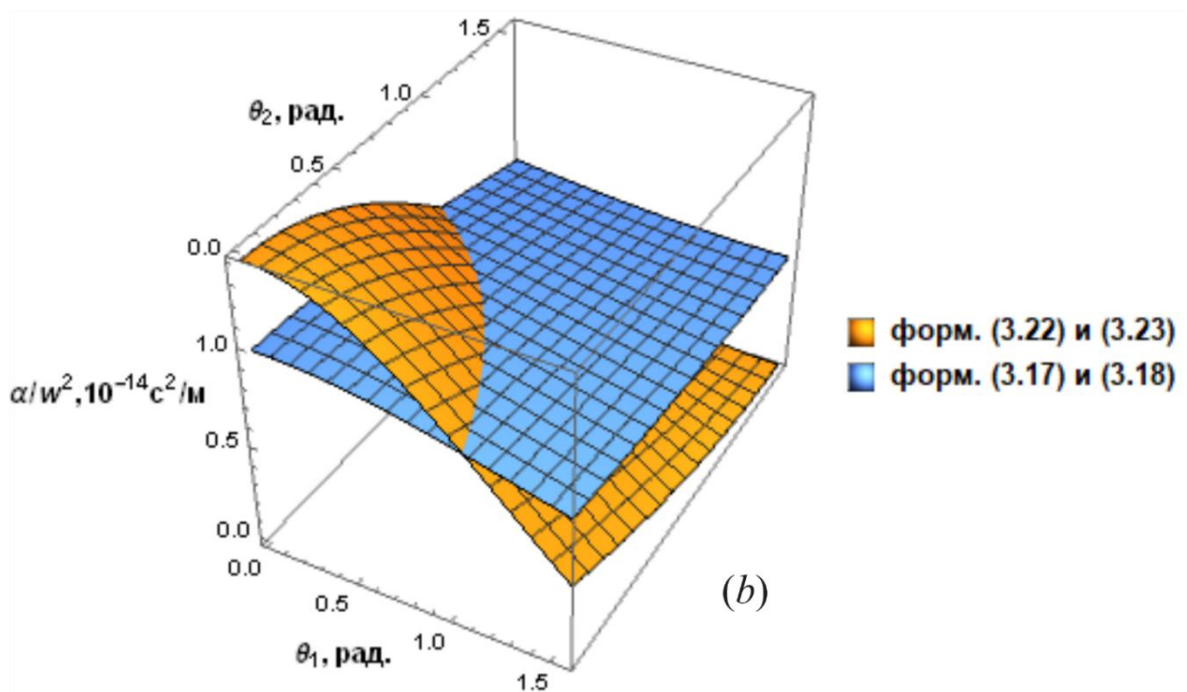
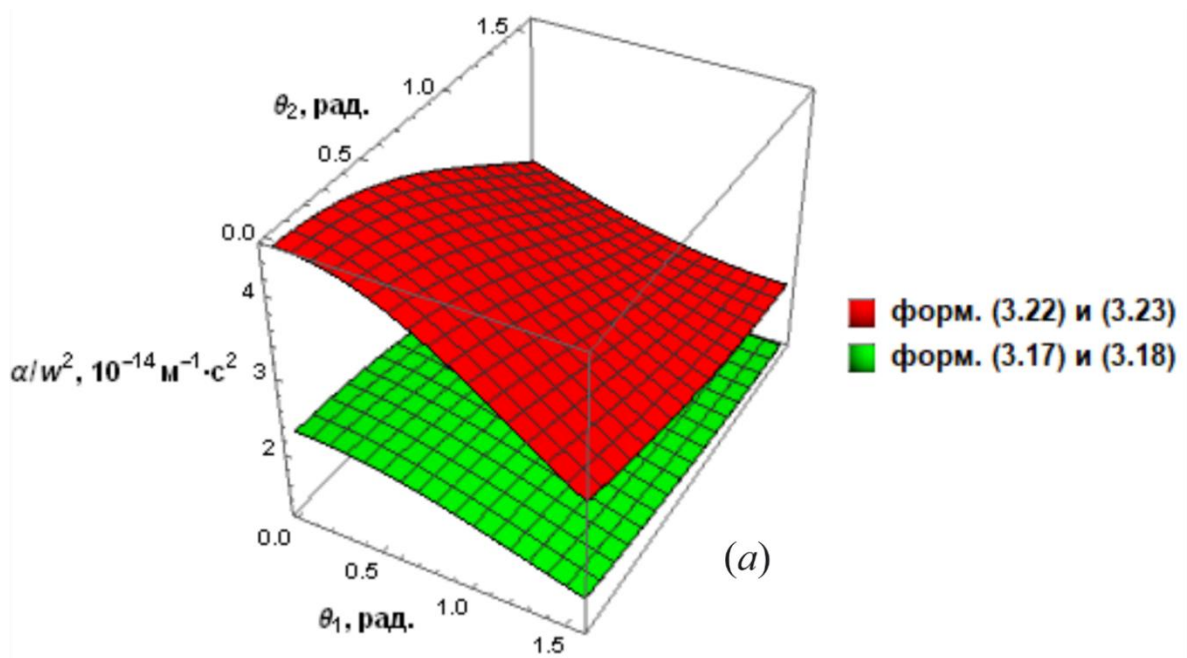


Рис. 4.1. Зависимость коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 от углов θ_1 и θ_2 при фиксированном значении $\xi_1-\xi_2=0^\circ$: (a)- для метилового спирта при температуре $t=20\text{ }^\circ\text{C}$; (b)- для воды при температуре $t=40\text{ }^\circ\text{C}$.

На рис. 4.2 показан результат численного расчета частотных зависимостей коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 для метилового спирта и воды для двух температур. Из рисунков видно, что область частотной дисперсии коэффициента поглощения согласно диффузионного закона (линии 2 и 4) составляет примерно пять декад, что является результатом учета влияния структурной релаксации, а частотная дисперсия, полученная по экспоненциальному закону (линии 1 и 3), дает два декады.

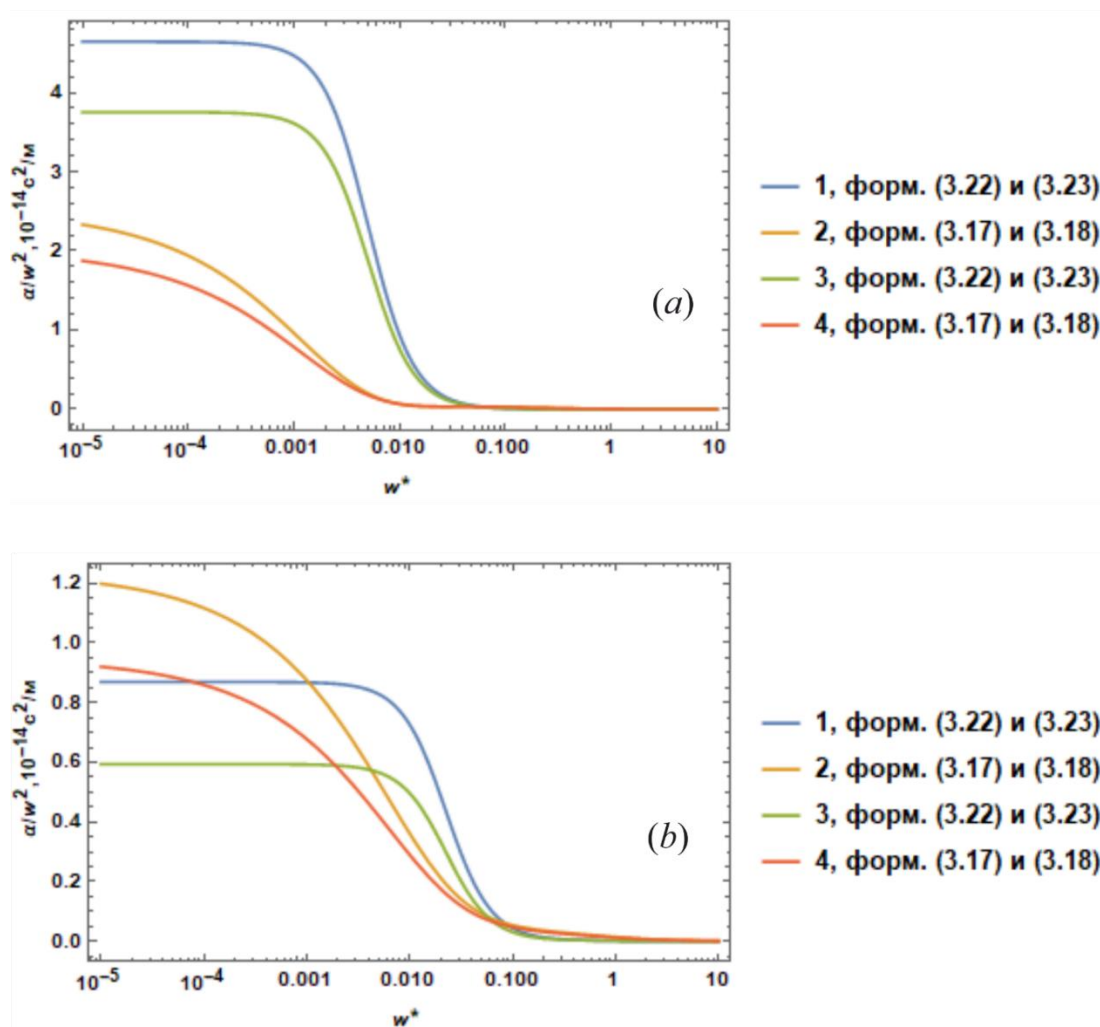


Рис. 4.2. Частотная зависимость коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 при фиксированных значениях $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ для двух температур: (a)- для метилового спирта (линии 1 и 2 при $t=20^\circ\text{C}$, линии 3 и 4 при $t=50^\circ\text{C}$); (b)- для воды (линии 1 и 2 при $t=10^\circ\text{C}$, линии 3 и 4 при $t=40^\circ\text{C}$).

На рис. 4.3 приведены зависимости изочастотной скорости распространения звуковых волн $C(\omega)$ для метилового спирта и воды от углов θ_1 и θ_2 при фиксированном значении $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и постоянной температуре.

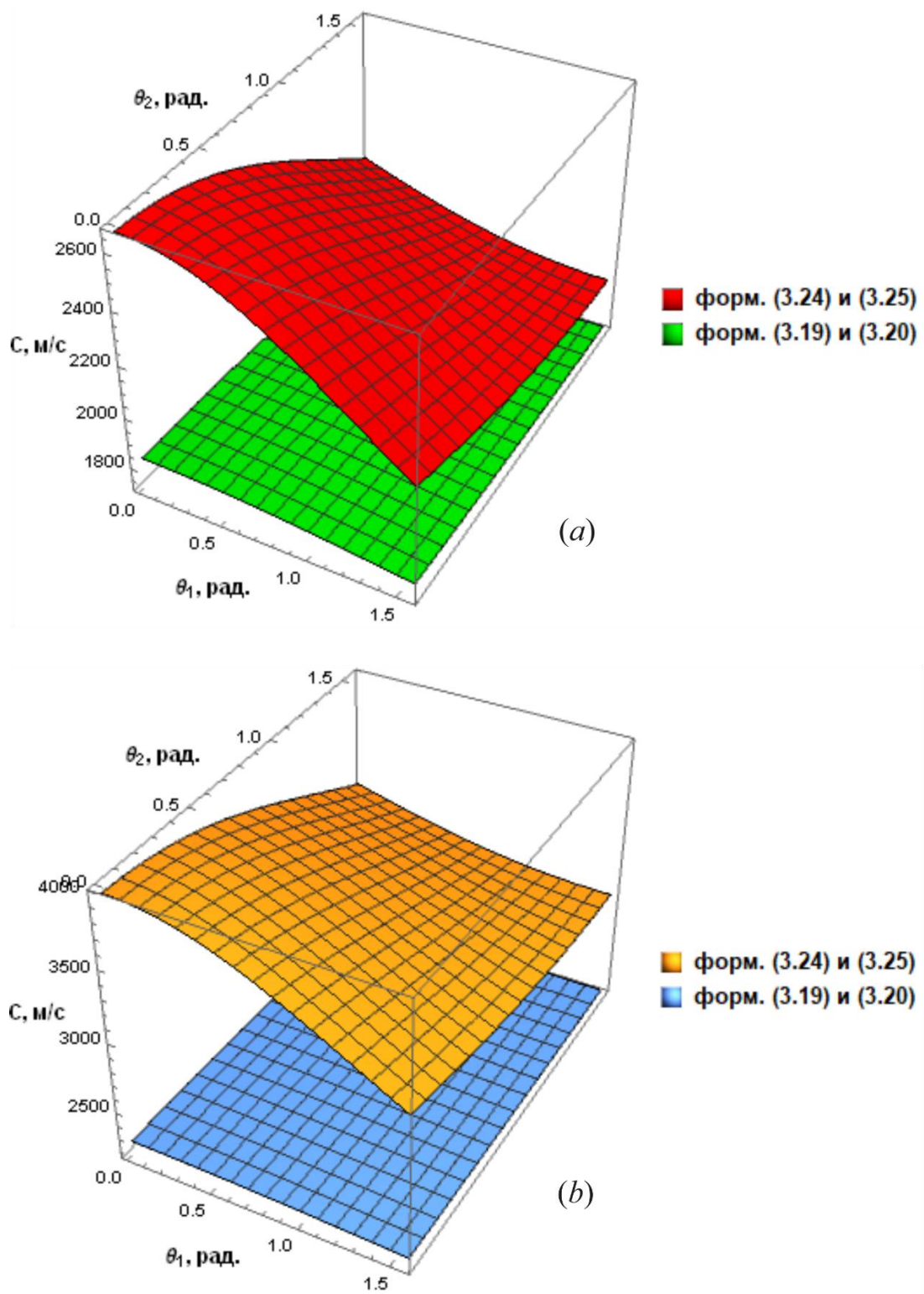


Рис. 4.3. Зависимость скорость звуковых волн $C(\omega)$ от углов θ_1 и θ_2 , при фиксированных значениях $\xi_1-\xi_2=0^\circ$: (a)- для метилового спирта при температуре $t=20^\circ\text{C}$; (b)- для воды при температуре $t=40^\circ\text{C}$.

Из рис. 4.3 следует, что при увлечении угла ориентации молекул скорость звука уменьшается и по-разному зависит от закона затухания релаксирующих потоков.

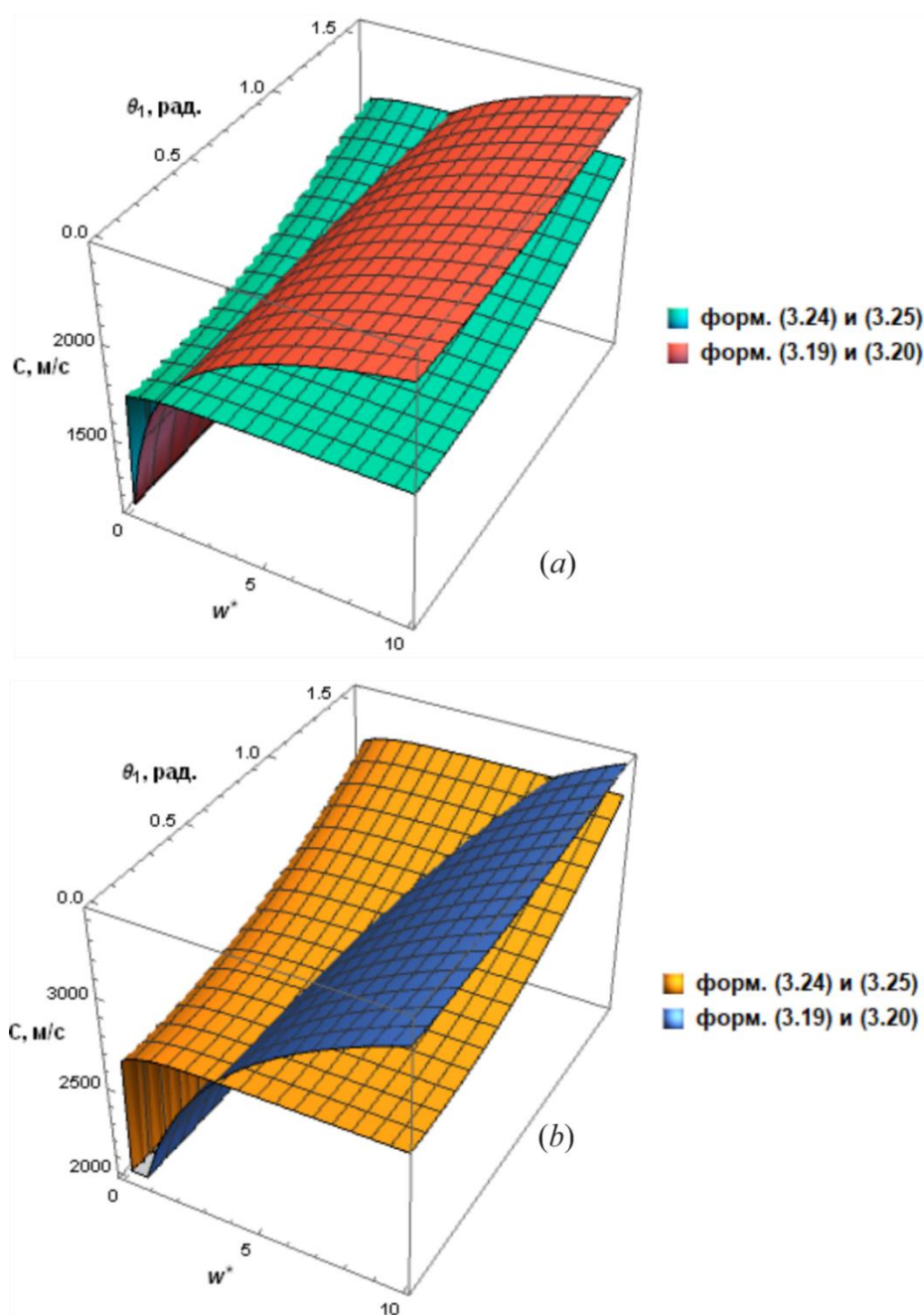


Рис. 4.4. Зависимость изотермических скоростей звука от приведенной частоты ω^* и угла ориентации молекулы θ_1 при фиксированных значениях $\theta_2=30^{\circ}$, $\xi_1-\xi_2=0^{\circ}$: (a)- для метилового спирта при температуре $t=20\text{ }^{\circ}\text{C}$; (b)- для воды при температуре $t=10\text{ }^{\circ}\text{C}$.

На рис. 4.4. приведена частотная дисперсия скорости распространения звуковых волн $C(\omega)$ для метилового спирта и воды от угла θ_1 при фиксированных значениях $\theta_2=\pi/6$ и $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и постоянной температуре.

Согласно рис. 4.4, области частотной дисперсии $C(\omega)$ на основе формул (3.19)-(3.20) являются широкими, а на основе формул (3.24)-(3.25) - узкими, что соответствует общей релаксационной теории [14,113,114].

На рис. 4.5.-4.7. приведены зависимости коэффициента поглощения и скорости распространения звуковых волн от угла ориентации молекулы $\theta_3=\xi_1-\xi_2$ для метилового спирта и воды при фиксированных углах θ_1 и θ_2 .

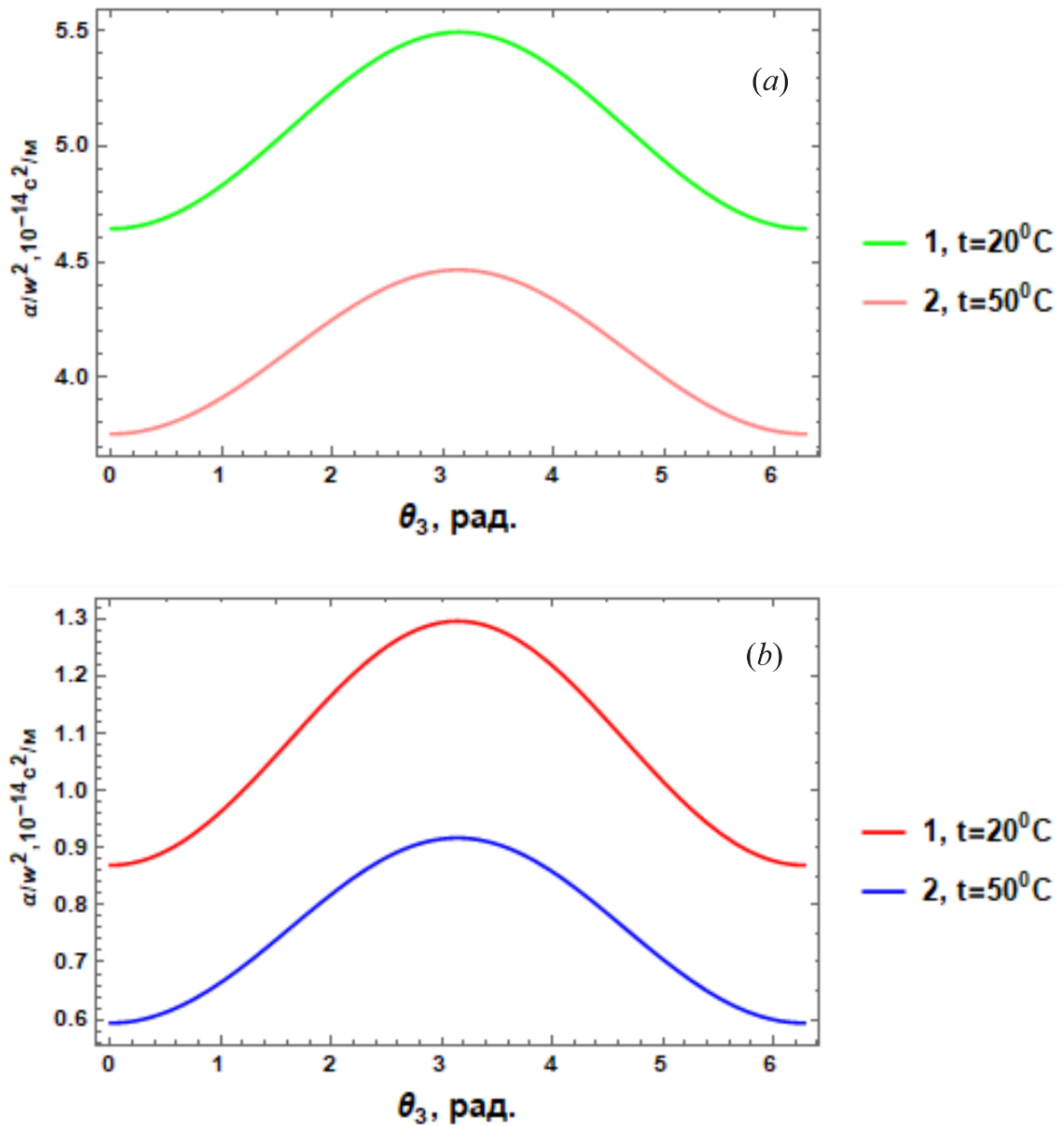


Рис. 4.5. Изотермические зависимости коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 от угла ориентации молекулы $\theta_3=\xi_1-\xi_2$ при фиксированных значениях $\omega\tau = \omega^* = 10^{-5}$, $\theta_2=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$ с учетом формул (3.22)-(3.23): (a)- для метилового спирта; (b)- для воды.

Из рисунков видно, что коэффициент поглощения звука зависит от закона затухания релаксирующих потоков по-разному, что обусловлено учётом вкладов релаксационных процессов в эти величины.

На рис. 4.7 приведены зависимости изочастотной скорости распространения звуковых волн $C(\omega)$ для метилового спирта от угла $\theta_3 = \xi_1 - \xi_2$ при фиксированных значениях θ_1, θ_2 и постоянной температуре. Из рис. 4.7 видно, что коэффициент поглощения звука не так сильно зависит от закона затухания релаксирующих потоков.

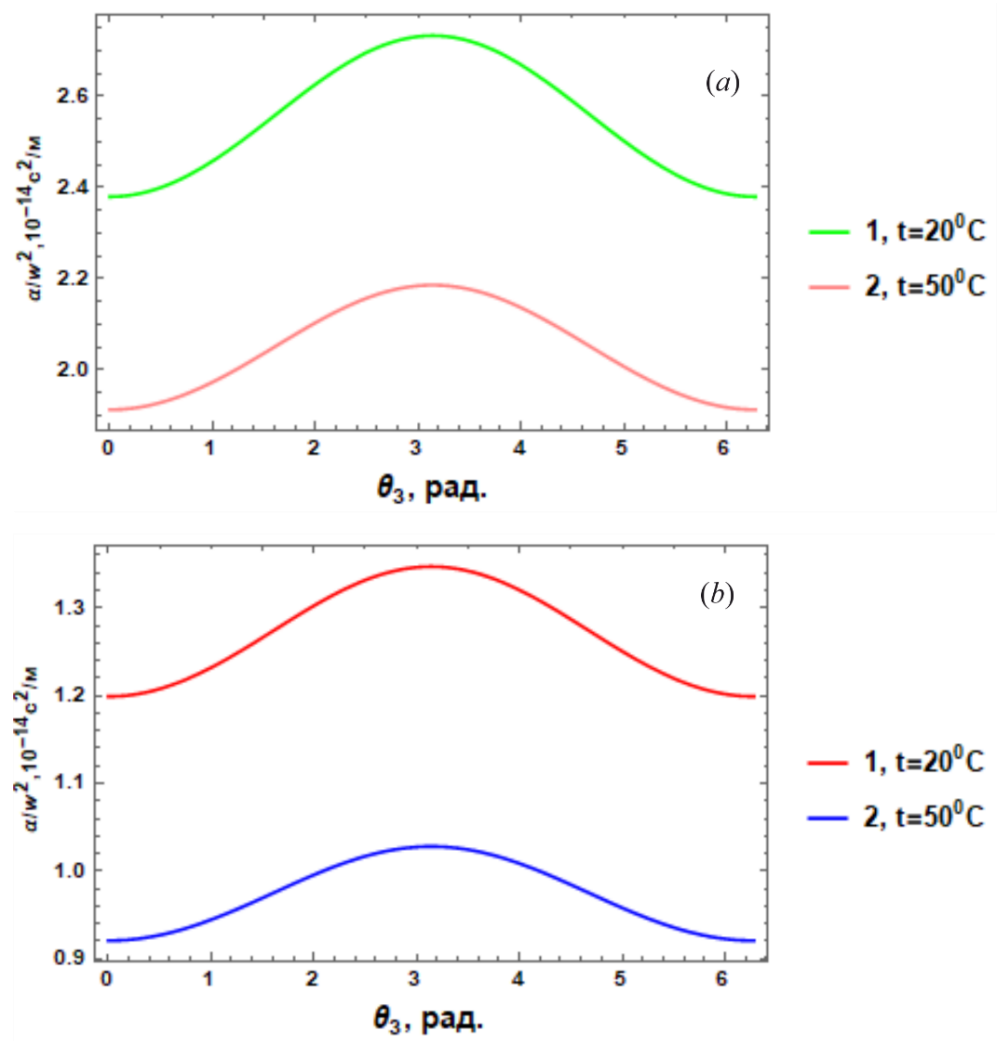


Рис. 4.6. Изотермическая зависимость коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 от угла ориентации молекулы $\theta_3 = \xi_1 - \xi_2$ при фиксированных значениях $\omega\tau = \omega^* = 10^{-5}$, $\theta_2 = 30^\circ$, $\theta_2 = 45^\circ$ с учетом формул (3.18)-(3.19): (a)- для метилового спирта; (b)- для воды.

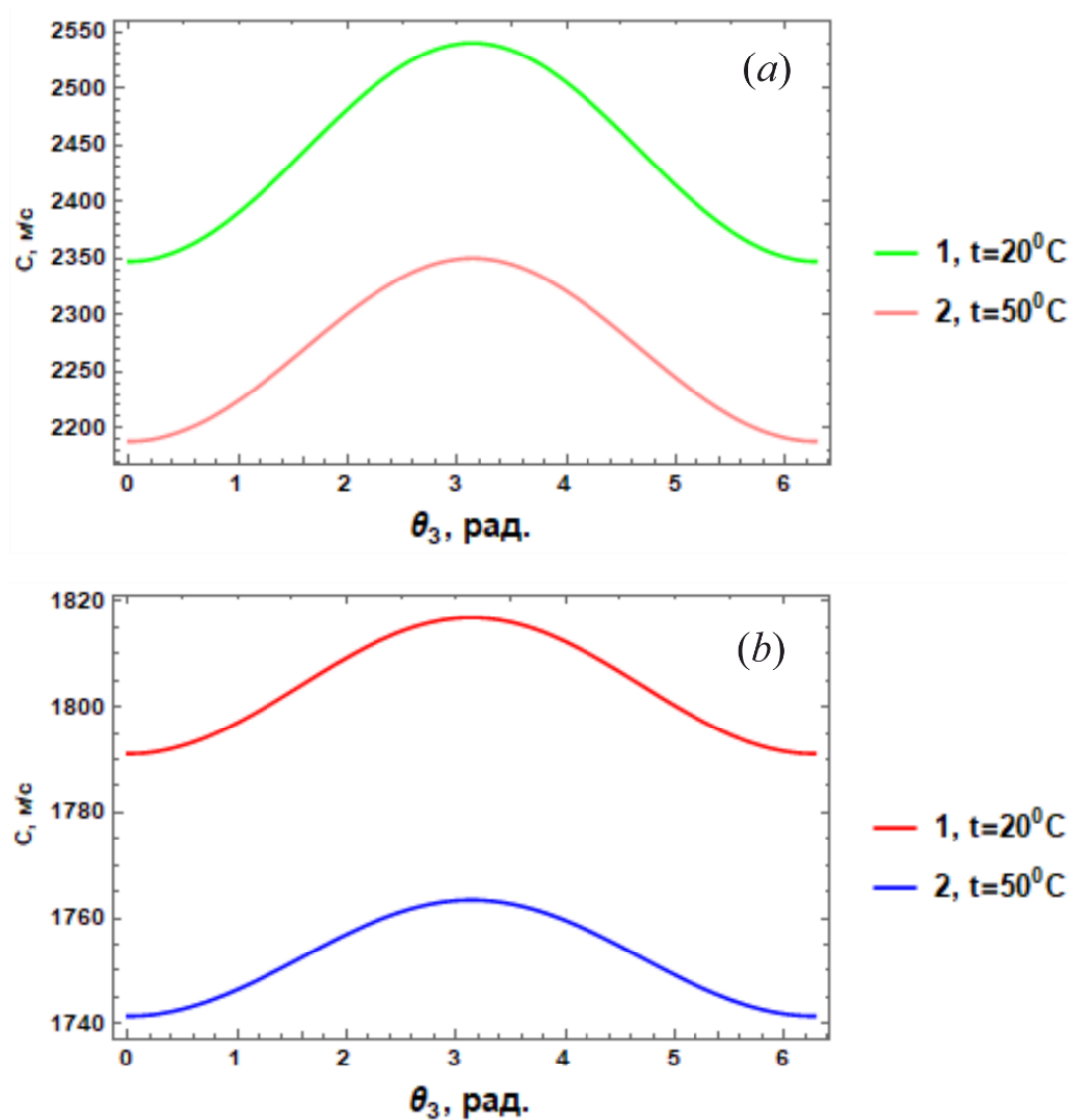


Рис. 4.7. Изотермическая зависимость скорости звуковых волн в метиловом спирте от угла ориентации молекулы $\theta_3 = \xi_1 - \xi_2$ при фиксированных значениях $\omega\tau = \omega^* = 10^{-5}$, $\theta_2 = 30^\circ$, $\theta_2 = 45^\circ$: линия 1 в (a)- с учетом формул (3.24)-(3.25); в (b)- с учетом формул (3.20)-(3.21).

Из полученных результатов видно, что акустические свойства полярных жидкостей зависят от закона затухания релаксирующих потоков по-разному, что обусловлено учётом вкладов релаксационных процессов в эти величины. Следовательно, акустические свойства полярных жидкостей тесно связаны с природой восстановления равновесной структуры и сложными взаимодействиями между молекулами, а также с влиянием различных факторов, таких как размерные эффекты и ориентация молекул.

4.2. Исследование скорости распространения и коэффициента поглощения звуковых волн в многоатомных жидкостях с квазисферическими молекулами

В этом параграфе рассмотрим зависимости акустических характеристик многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами от термодинамических параметров состояния и частоты с учётом природы рассасывания необратимых потоков, когда релаксирующие потоки затухают по степенному или экспоненциальному законам [5-А,16-А]. При этом для исследования акустических характеристик многоатомных жидкостей, как и в случае главы 3, будем учитывать (2.22)-(2.25) в выражениях (3.1) и (3.2), коэффициент трения жидкостей β и радиальную функцию распределения (3.12)-(3.14). Для более подробного исследования проведем численный расчет скорости $C(\omega)$ и коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ звуковых волн от термодинамических параметров состояния и частот.

При этом целесообразно сосредоточиться на неполярных жидкостях, молекулы которых обладают квазисферической формой. Как показано в §2.2, это означает, что форма молекул близка к шаровой, и они характеризуются высокой степенью симметрии. Одной из ключевых характеристик таких молекул является ацентричность - отсутствие центра симметрии. Для симметричных молекул метана (CH_4), тетрафторметана (CF_4) и диоксида углерода (CO_2) центр симметрии существует, благодаря чему такие молекулы являются неполярными и их дипольный момент равен нулю. Это упрощает описание межмолекулярных взаимодействий (3.1), т.е. в таких системах можно пренебречь диполь-дипольными и другими полярными эффектами. В связи с этим, при описании акустических свойств таких жидкостей в §2.2 был использован потенциал Леннард-Джонса (3.4), который адекватно отражает основные особенности взаимодействия между неполярными молекулами. Радиальную функцию распределения принимаем в виде (3.12)-(3.14). В этом параграфе тоже в качестве многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами рассмотрены жидкие CH_4 и CF_4 [5-А]. Молекулярные

параметры, входящие в потенциал Леннард-Джонса (ϵ/k , σ), взяты из работ [146,152], а соответствующие экспериментальные значения плотности и температуры - из [11].

Таблица 4.3.
Зависимость коэффициента поглощения звука от температуры
и плотности для жидкого метана ($\omega^* = 10^{-5}$).

Т, К [11]	ρ , кг/м ³ [11]	с, м/с [11]	$\alpha/\omega^2 \cdot 10^{14}$, м ⁻¹ ·с ² (форм. (4.2))		
			[11]	с учетом форм. (3.22) и (3.23)	с учетом форм. (3.17) и (3.18)
100,0	440,0	1444,0	0,338	0,657	0,24
120,0	413,0	1245,0	0,380	0,516	0,189
140,0	380,0	1040,0	0,576	0,484	0,182
150,0	361,0	926,0	0,730	0,514	0,197
160,0	339,0	797,0	1,070	0,603	0,237
170,0	312,0	646,0	1,840	0,835	0,336
180,0	277,0	483,0	4,100	1,421	0,583

Таблица 4.4
Зависимость коэффициента поглощения звука от температуры
и плотности для жидкого тетрафторметана ($\omega^* = 10^{-5}$).

Т, К[11]	ρ , кг/м ³ [11]	с, м/с [11]	$\alpha/\omega^2 \cdot 10^{14}$, м ⁻¹ ·с ² (форм. (4.2))		
			[11]	с учетом форм. (3.22) и (3.23)	с учетом форм. (3.17) и (3.18)
90,0	1906,5	1097,0	3,520	3,665	2,585
110,0	1814,0	963,0	2,540	2,808	1,761
130,0	1713,0	830,0	2,210	2,521	1,484
150,0	1604,0	694,0	2,590	2,634	1,500
170,0	1478,0	562,0	3,730	3,094	1,739
190,0	1339,0	428,0	7,230	4,734	2,675
200,0	1225,0	362,0	11,900	5,373	3,033

В табл. 4.3 приведены результаты численных расчетов коэффициента поглощения звуковых волн в зависимости от температуры и плотности, выполненных по формуле (3.2) при частоте $\omega^* = 10^{-5}$ для жидкого метана и тетрафторметана. Из табл. 4.3 следует, что полученные теоретические результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными.

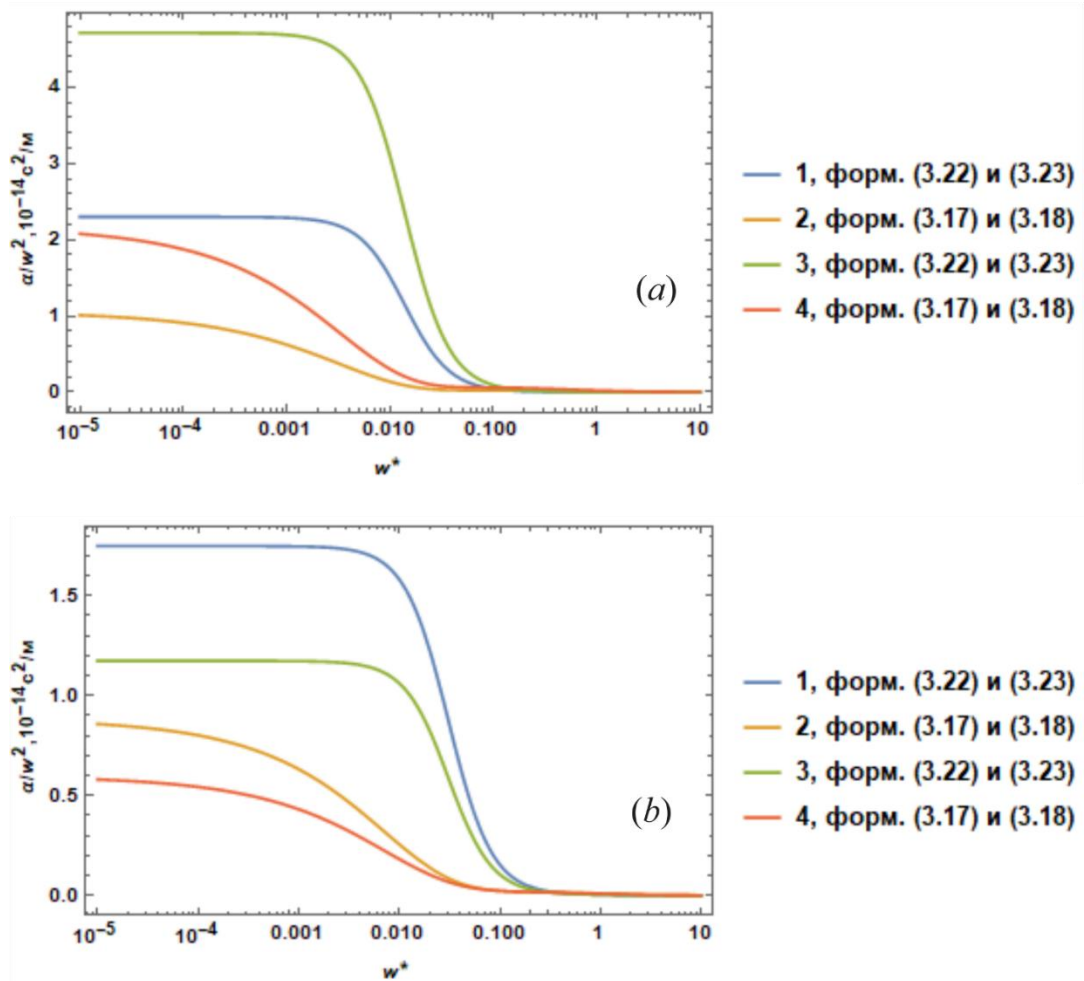


Рис. 4.8. Частотная зависимость коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 при двух температурах: (a)- для жидкого метана (линии 1 и 2 при $T=150 \text{ K}$, линии 3 и 4 при $T=120 \text{ K}$; (b)- для жидкого диоксида углерода (линии 1 и 2 при $T=110 \text{ K}$, линии 3 и 4 при $T=170 \text{ K}$).

На рис. 4.8 показан результат численного расчета частотных зависимостей коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 для метана и диоксида углерода при двух температурах. Из рисунков видно, что область

частотной дисперсии коэффициента поглощения (линии 2 и 4), согласно диффузионного закона, составляет примерно 10^5 Гц, что является результатом учета влияния структурной релаксации, а частотная дисперсия, полученная по экспоненциальному закону (линии 1 и 3) составляет $\sim 10^2$ Гц.

На рис. 4.9 приведены частотные и температурные зависимости скорости звука $C(\omega)$ для жидкого метана и жидкого диоксида углерода согласно формуле (3.1) с учетом диффузного и экспоненциального затухания потоков.

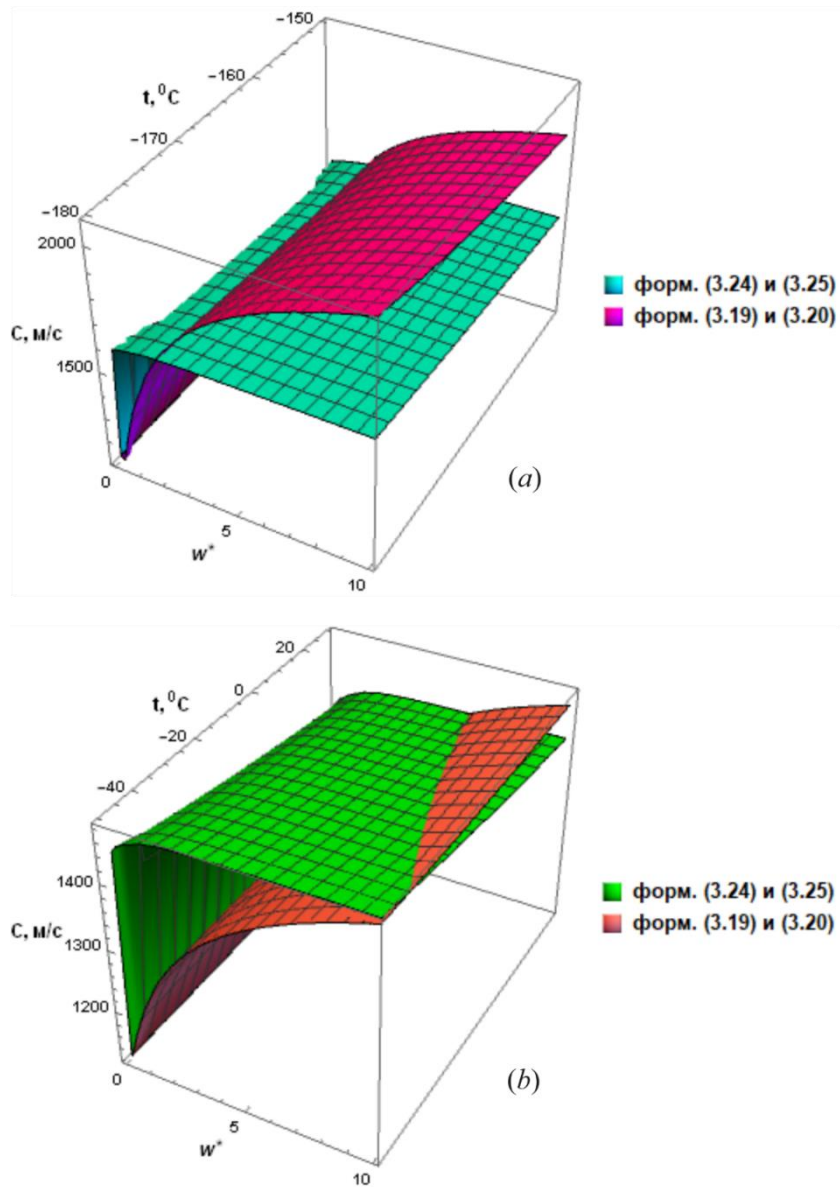


Рис. 4.9. Зависимость изотермической скорости звука от приведенной частоты ω^* и температуры: (a)- для жидкого метана; (b)- для жидкого диоксида углерода.

Согласно рис. 4.8 и рис.4.9, области частотной дисперсии коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 и скорости звука $C(\omega)$ на основе формул (3.17)-(3.20) являются широкими, а на основе формул (3.22)-(3.25) - узкими, что соответствует общей релаксационной теории [14,113,114].

Полученные данные показывают, что акустические свойства полярных и многоатомных жидкостей по-разному зависят от закона затухания релаксирующих потоков, что связано с различной природой релаксационных механизмов, вносящих вклад в формирование этих свойств. Установлено, что такие характеристики определяются не только особенностями межмолекулярного взаимодействия, но и динамикой восстановления равновесной структуры, а также влиянием ориентационной структуры молекул и масштабных эффектов.

Заключение к главе 4

На основе уравнений обобщённой гидродинамики получены молекулярные выражения для скорости и коэффициента поглощения звука, учитывающие микроскопическую зависимость от пространственно-временных масштабов. Выполнены численные расчёты указанных акустических характеристик в широком интервале термодинамических параметров состояния и частот для полярных и многоатомных жидкостей. Результаты сопоставлены с теоретическими и экспериментальными данными.

ОБЩИЕ ВЫВОДЫ

1. Для жидкостей, молекулы которых имеют сферическую форму, получено уравнение бинарной плотности частиц в конфигурационном пространстве и найдено его общее решение [1-А,6-А,7-А].

2. Учитывая законы затухания релаксирующих потоков в импульсном и конфигурационном пространствах, получены динамические выражения для коэффициентов вязкостей и модулей упругости жидкостей [1-А,2-А,6-А,7-А,10-А].

3. Проанализированы динамические вязкоупругие и акустические свойства полярных жидкостей с учётом особенностей их молекулярной структуры при выборе потенциала межмолекулярного взаимодействия $\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b)$ в виде взаимодействия полярных молекул с большим дипольным моментом. Для случая многоатомных жидкостей рассмотрены неполярные жидкости с квазисферическими молекулами при помощи потенциала Леннарда-Джонса. При этом радиальная функция распределения $g(|r|)$ и бинарная функция распределения двух полостей $y(\rho^*)$ разделены на три области: при $0 < r < \sigma$ использовано выражение Карнахана–Старлинга; при $1 < r < 2$ - выражение Вертхейма; на расстояниях $2 < r < 5$ бинарная функция распределения считается малой и не учитывается [3-А,4-А,9-А,15-А,16-А].

4. Проведен численный расчет зависимости коэффициентов вязкости и модулей упругости от плотности, температуры и частоты в многоатомных и полярных жидкостях. Показано, что область частотной дисперсии исследуемых жидкостей при диффузионном механизме затухания является широкой ($\sim 10^5$ Гц), а в случае экспоненциального механизма закона затухания является узкой ($\sim 10^2$ Гц), что находится в соответствии с результатами релаксационной теории [3-А,4-А,8-А,10-А,11-А,14-А].

5. Проведен численный расчет скорости распространения и коэффициента поглощения акустических волн для многоатомных и полярных жидкостей от температуры, плотности и угловой ориентации молекул для полярных жидкостей. Определены области частотной дисперсии

акустических свойств многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами и полярных жидкостей с учётом влияния природы затухания релаксирующих потоков. Полученные результаты сравнены с экспериментальными данными [5-А,12-А,13-А].

РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ПРАКТИЧЕСКОМУ ИСПОЛЬЗОВАНИЮ РЕЗУЛЬТАТОВ

В работе предложена теория жидкого состояния на основе молекулярно-кинетического подхода к динамическим явлениям, раскрывающая природу внутренних релаксационных механизмов в жидкостях, а также их влияние на динамические вязкоупругие и акустические свойства многоатомных и полярных жидкостей. В процессе исследования приняты во внимание угловые ориентации сложных молекул, а также влияние внутренних релаксационных процессов, происходящих в жидкостях в широком диапазоне изменений термодинамических параметров и частоты внешних воздействий. Результаты численных расчётов расширяют существующую базу данных о вязкоупругих свойствах рассмотренных жидкостей, а также устанавливают зависимость вязкоупругих свойств от их молекулярного строения, что дает возможность оптимизировать условия работы различных технологических устройств.

Материалы диссертации могут быть полезными студентам физических, химических и др. специальностей при выполнении ими дипломных работ, а также магистрам, соискателям, докторантам и аспирантам при выполнении научных работ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Френкель, Я.И. Кинетическая теория жидкостей / - Ленинград: Наука, - 1975. – 592 с.
2. Viswanath, D.S. Viscosity of Liquids: Theory, Estimation, Experiment, and Data / D.S Viswanath, T.K Ghosh, D.H.L. Prasad, N.V.K. Dutt, Y.Kalipatnapu // Springer Science & Business Media, 2007, 662 p.
3. Daubert, T.E. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals: DIPPR: Data Compilation: / T.E. Daubert, H.M. Sibul, C.C.Stebbins, R.P. Danner, T.L. Marshall, R.L. Rowley, M.E. Adams, W.V.Wilding // Taylor & Francis, 2000. 6100 p.
4. Barlow, A. J. The Effect of Pressure on the Viscoelastic Properties of Liquids / A. J.Barlow, G.Harrison, J.B. Irving, M.G. Kim, J. Lamb, W.C. Pursley // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. -1972. -V. 327. -N. 1570, -P.403-412.
5. Vahedpour, M. Relaxation Time for Bulk Viscosity of Soft-Sphere and Lennard-Jones Fluids / M. Vahedpour, S. Alavi, B. Najafi, E. Keshavarzi // Scientia Iranica. –2007. –V. 14. –N 2. – P.126-132.
6. Yuan, Ge. Determination of bulk viscosity of liquid water via pulse duration measurements in stimulated Brillouin scattering / Ge. Yuan, Shi Jiulin, Zhu Kaixing, He. Xingdao // Chinese Optics Letters. –2013.–11(11). - P.112902 (1-5).
7. Родннкова, М.Н. Подвижность молекул и структура полярных жидкостей / М.Н. Родннкова, Ф.М. Самигуллин, И.А. Солонина, Д.А. Сироткин // Журнал структурной химии. -2014.-Т.55.-№2.- С.276–282.
8. Дембелова, Т.С. Исследование нелинейности сдвиговой упругости наносuspензий акустическими методами / Т.С. Дембелова, Д.Н. Макарова, Б.Б. Бадмаев // Известия Российской академии наук. Серия физическая. - 2021.-Т.85.-№6.- С.849-853.
9. Дембелова, Т.С. Низкочастотная сдвиговая упругость гомологического ряда нормальных углеводородов / Т.С. Дембелова, Д.Н. Макарова, Б.Б. Бадмаев // Акустический журнал. -2024. -Т.70. -№1. -С. 35-39.

10. Вековищев, М.П. Неньютоновское течение структурированных систем. XXXIX. Упругость при низких частотах и скоростях сдвига / М.П. Вековищев, Е.А. Кирсанов // Жидкие кристаллы и их практическое использование. -2024. -Т.24. -№3. - С.61-70.
11. Михайленко, С.А. Акустическая релаксация в жидком метане и тетрафторметане / С.А. Михайленко, Б.Г. Дударь // Физика низких температур. – 1976. – Т.2. – №1. –С. 93–104.
12. Есипов, И.Б. Резонансный метод измерения сдвиговых вязкоупругих свойств жидких сред на основе возбуждения крутильных колебаний в трубках / И.Б. Есипов, О.М. Зозуля, А.В. Фокин // Акустический журнал. - 2010. -Т. 56. -№ 1. -С.124-134.
13. Holmes, M.J. Temperature dependence of bulk viscosity in water using acoustic spectroscopy / M.J. Holmes, N.G. Parker, M.J. Povey // Journal of physics. Conference series. -2011. -V. 269 (1). -P. 012011-(1-7).
14. Бадмаев, Б.Б. Низкочастотная сдвиговая упругость жидкостей / Б.Б., Бадмаев, С.А. Бальжинов, Б.Б. Дамдинов, Т.С. Дембелова // Акустический журнал. -2010, -Т. 56. - № 5. - С. 602-605.
15. Неручев, Ю.А. Исследования скорости ультразвука в органических жидкостях на линии насыщения / Ю.А. Неручев , М.Ф. Болотников, В.В. Зотов // Теплофизика высоких температур. -2005. -Т. 43. -№ 2. -С. 274-316 с.
16. Желнорович, В.А. Электромагнитные и магнитозвуковые волны в намагничивающихся и поляризующихся жидкостях / В.А. Желнорович // Акустический журнал. -2013. –Т. 59, -№ 4. -С. 433-437.
17. Хасаншин, Т.С. Скорость звука в жидких 1-алкенах / Т.С. Хасаншин , О.Г. Поддубский, А.П. Щемелев //Теплофизика высоких температур. -2005. - Т. 43. -№ 4. –С. 533-539.
18. Хасаншин, Т.С. Скорость звука в бинарных жидких смесях Н-алканов / Т.С. Хасаншин, В.С. Самуйлов, А.П. Щемелев // Теплофизика высоких температур. -2009. -Т. 47. -№ 4. –С. 556-561.

19. Бабий, В.И. Дифракционные эффекты при измерении скорости звука в жидкостях / В.И. Бабий // Известия ЮФУ. Технические науки. - 2009. - № 6 (95). –С. 169-174.
20. Бабий, В.И. О метрологии скорости звука в жидкости / В.И. Бабий // Акустический журнал. -2017. -Т. 63. -№ 3. –С. 251-264.
21. Гасанов, Э.Г. Коэффициент поглощения акустических волн в проводящей жидкости: термодинамическое исследование влияния электрического и магнитного полей / Э.Г. Гасанов // Наука, техника и образование. -2019. -№ 6 (59). –С.5-7.
22. Серавин, Г.Н. Прямые импульсные методы измерения скорости звука в жидкости / Г.Н. Серавин, И.И.Микушин, В.Н. Лобанов //Известия ЮФУ. Технические науки. -2011. -№ 9 (122). –С. 238-243.
23. Комаров, С.Г. Экспериментальное исследование скорости звука в жидком и газообразном хладагенте R-407C / С.Г. Комаров, С.В. Станкус // Теплофизика и аэромеханика. -2016. -Т. 23. -№ 1. –С.141-143.
24. Капительный, А.Г. Измерения скорости звука в жидком железе / А.Г. Капительный, А.М. Кондратьев, А.Е. Плетнев, А.Д. Рахель //Вестник Объединенного института высоких температур. -2018. -Т.1. -№ 1. –С. 36-39.
25. Шамсутдинова, Е.С. Совершенствование методов исследования электрофизических и вязкостных свойств жидкостей / Е.С. Шамсутдинова, В.И. Анисимкин, А.С. Фионов, А.В. Смирнов, В.В. Колесов, И.Е. Кузнецова // Акустический журнал. -2023, -Т. 69. -№ 1, -С. 56–62.
26. Неручев, Ю.А. Скорость звука в жидкой фазе изомеров гексана / Ю.А. Неручев, А.К. Радченко // Теплофизика высоких температур. -2018. -Т. 56. - №1. –С.137-140.
27. Зайцев, Б.Д. Определение скорости и затухания акустической волны в жидкостях с различным акустическим импедансом с помощью акустического интерферометра / Б.Д. Зайцев, И.А. Бородина, А.А. Теплых, А.П. Семёнов // Акустический журнал. -2023, -Т. 69. -№ 4, -С.438–445.
28. Бражкин, В.В. Тайны воды и других аномальных жидкостей: “Медленный” звук, релаксирующие сжимаемость и теплоемкость / В.В.

- Бражкин, И.В. Данилов, О.Б. Циок // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. -2023. -Т. 117. -№ 11-12 (6). –С.840-856.
29. Кольцова, И.С. Акустоэлектронный метод измерения скорости ультразвуковых волн в жидкостях / И.С. Кольцова, А.С. Хомутова // Акустический журнал. -2023. -Т. 69. -№ 3. –С.317-321.
30. Ashurst, W.T. Dense-fluid shear viscosity via nonequilibrium molecular dynamics / W.T. Ashurst, W.G. Hoover // Physical review. A, General physics. - 1975. -V.11. N.2. – P. 658-678.
31. Heyes, D.M. Self-diffusion and shear viscosity of simple fluids. A molecular-dynamics study / D.M. Heyes // Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2. -1983. -V.79. – P.1741-1758.
32. Rowley, R.L. Diffusion and viscosity equations of state for a Lennard-Jones fluid obtained from molecular dynamics simulations / R.L. Rowley, M.M. Painter // International Journal of Thermophysics. -1997, -V. 18. – P. 1109–1121.
33. Hess, B. Determining the shear viscosity of model liquids from molecular dynamics simulations / B. Hess // Journal of Chemical Physics. 2002. -V. 116. -N 1. – P. 209-217.
34. Fernández, G.A. A molecular simulation study of shear and bulk viscosity and thermal conductivity of simple real fluids / G.A. Fernández, J. Vrabec, H. Hasse // Fluid Phase Equilibria. -2004. –V.221. –P. 157–163.
35. Delgado-Barrio, G. Viscosity of Liquid Water via Equilibrium Molecular Dynamics Simulations / G. Delgado-Barrio, R. Prosmiti, P.Villarreal, G. Winter, J.S. Medina, B. González et al.// Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics. Springer Science + Business Media B.V. -2008, -p. 351–361.
36. Moore, R.J.D. Rotational viscosity of fluids composed of linear molecules: an equilibrium molecular dynamics study / R.J.D. Moore, J.S. Hansen, B.D. Todd // J. Chem Phys. -2008. -V. 28. –N 22. –P.224507.
37. Thomas, J.C. Transient molecular dynamics simulations of liquid viscosity for nonpolar and polar fluids / J.C. Thomas, L.R. Richard // The Journal of Chemical Physics. -2011. –V.134, -P. 024526.

38. Zhang, Y. Reliable Viscosity Calculation from Equilibrium Molecular Dynamics Simulations: A Time Decomposition Method / Y. Zhang, A. Otani, E.J. Maginn // *Journal of Chemical Theory and Computation*. -2015, -V.11. -N. 8. -P. 3537–3546.
39. Rudyak, V. Molecular dynamics simulation of fluid viscosity in nanochannels / V. Rudyak, A. Belkin // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. -2018. -V.9. N.3. -P. 349-355.
40. Jaeger, F. Bulk viscosity of molecular fluids / F. Jaeger, K.O. Matar, E. Muller // *The Journal of Chemical Physics*. -2018. -V. 148. -N.17. -P. 174504.
41. Hafner, R. Sampling the Bulk Viscosity of Water with Molecular Dynamics Simulation in the Canonical Ensemble / R. Hafner, G. Guevara-Carrion, J. Vrabec, P. Klein. // *The Journal of Physical Chemistry B*. -2022. -V.126. -N. 48, -P.10172–10184.
42. Cesare, M. Viscosity in water from first-principles and deep-neural-network simulations / M.Cesare, Z. Linfeng, C. Roberto, B. Stefano, T. Davide // *NPJ Computational Materials*. -2022. -V. 8(1):139. -P.1-10.
- 43 Xingyu, Ch. Molecular dynamics study of confined liquid film viscosity in Constant-Pressure and Constant-Distance systems / Ch. Xingyu, Z. Hedong, Y. Hayata, W.Ch. Fong Woei, F. Kenji, I. Shintaro // *Journal of Molecular Liquids*. -2024. -V. 404. -P. 124955.
44. Renneis, H. Characteristic Curves of Polar Fluids: (I) The Two-Center Lennard–Jones Plus Dipole Fluid. / H. Renneis, S. Stephan // *International Journal of Thermophysics*. -2024. -V.45. - N.77. -P. 1-29.
45. Неручев, Ю.А. Расчет скорости звука в органических жидкостях по данным об энергии межмолекулярных сил / Ю.А. Неручев, А.В. Шахов, Н.А. Катаева // *Ультразвук и термодинамические свойства вещества*. -2004. -№ 30-31. -С.112-119.
46. Локтионов, И.К. Расчет скорости звука в простой жидкости на линии насыщения / И.К. Локтионов, Л.П. Мироненко // *Ультразвук и термодинамические свойства вещества*. -2014. -№ 39. -С. 67-70.

47. Акуленко, Л.Д. Определение резонансным методом динамических свойств гранулированных сред, пропитанных жидкостью / Л.Д. Акуленко, А.А. Гавриков, С.В. Нестеров // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. -2013. -№ 5. –С. 96-108.
48. Каплун, А.Б. Малопараметрическое уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ в жидком и газообразном состоянии / А.Б. Каплун, А.Б. Мешалкин // Журнал физической химии. -2013. -Т. 87. -№ 8. –С.1294.
49. Мельников, Г.А . Скорость звука в жидкостях в рамках кластерной модели / Г.А. Мельников, Н.М. Игнатенко // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Физика и химия. -2013. -№ 1. -С.44-51.
50. Локтионов, И.К. Расчет термодинамических свойств аргона в модели простой жидкости с трехпараметрическим потенциалом взаимодействия / И.К. Локтионов // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. -2016. -№ 4. –С.156-167.
51. Губайдуллин, Д.А. Звуковые волны в жидкости с полидисперсными парогазовыми пузырьками / Д.А. Губайдуллин, Ю.В. Федоров // Акустический журнал. -2016. -Т. 62. -№ 2. –С.178.
52. Решетникова, О.В. Об определении модельной скорости звука для решения задачи о плоском сдвиговом течении жидкости методом гидродинамики сглаженных частиц (SPH) / О.В. Решетникова // Компьютерные исследования и моделирование. -2024. -Т.16. -№ 2. –С.339-351.
53. Kirkwood, J.G. The statistical mechanical theory of transport processes. III The coefficients of shear and bulk viscosity of liquids / J.G. Kirkwood, F.P. Buff, M.S. Green // J. Chem. Phys. -1949, -V.17. N.10. –P. 988-994.
54. Cummings, P.T. Nonequilibrium molecular dynamics approaches to transport properties and non-Newtonian fluid, / P.T. Cummings, D.J. Evans // Ind. Eng. Chem. Res. -1992. –V.31. –P.1237-1252.

55. Kirkwood, J.G. The statistical mechanical theory of irreversible processes / J.G. Kirkwood // *Nuovo Cimento Suppl.* -1949. –V.6. –N 2. –P.233-236.
56. Kirkwood, J.G. The radial distribution function in liquids/ J.G. Kirkwood, E.M. Boggs // *J. Chem. Phys.* -1942. –V.10. –P. 394.
57. Born, M.A. General Kinetic Theory of Liquids / M. Born, H.S. Green // Cambridge Univ. Press, London. -1949. -98 p.
58. Born, M.A. A kinetic theory of liquids / M. Born and H. S. Green // *Nature.* - 1947. -V.159. –P.251-254.
59. Rice S.A. On an approximate theory of transport in dense media / S.A. Rice, J.G. Kirkwood // *J. Chem. Phys.* -1959. –V.31. -N4. –P.901-908.
60. Brush, S.G. Theories of liquid viscosity / S.G. Brush // *Chem. Rev.* / -1962. - V.62. –P.513-548.
61. Hirschfelder, J.O. Molecular Theory of Gases and Liquids / J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, R.B. Bird // John Wiley, New York. Chapman & Hall, London. -1954. -1219 p.
62. Moore, R.J. Structure of the liquid state and viscosity of hydrocarbons / R.J. Moore, P. Gibbs, H. Eyring // *J. Phys. Chem.* -1953. -V.57. –P.172-178.
63. Collins, F.C. Activation energy of the Eyring theory of liquid viscosity and diffusion / F.C. Collins // *J. Chem. Phys.* -1957. –V.26. N 2. –P. 398-400.
64. Macedo, P.B. On the relative roles of free volume and activation energy in the viscosity of liquids / P.B. Macedo, T.A. Litovitz // *J. Chem. Phys.* -1965. –V.42. N 1. –P. 245-256.
65. Шахпаронов, М.И. Теория вязкости жидкостей I. Основные положения / М.И. Шахпаронов // *Журнал физической химии.* -1980, -Т.54. –В.2. –С.307-311.
66. Shakhparonov, M. I. Theory of the viscosity of liquids. IV: Benzene, Alcohols Eyring theory / M.I. Shakhparonov // *Zhur. Fiz. Khim. USSR.* -1980. V.54. – P.582-584.
67. Eyring, H. Significant structures in the liquid state. I, Proc / H. Eyring, T. Ree, N. Hirai // *Natl. Acad. Sci. (USA).* -1958. -V.44. N.7. –P. 683-688.

68. Davis, H.T. The kinetic theory of dense fluids. IX. The fluid of rigid spheres with a square-well attraction / H.T. Davis, S.A. Rice, J.V. Sengers // J. Chem. Phys. -1961. –V.35. –P. 2210-2233.
69. Davis, H.T. Transport properties of a dense fluid of molecules interacting with a square well potential / H.T. Davis, K.D. Luks // J. Phys. Chem. -1965. –V.69. N.3. –P.869-880.
70. Lowry, B.A. Perturbation calculation of mixed pair correlation functions / B.A. Lowry, H.T. Davis, S.A. Rice // Phys. Fluids. -1964. –V.7. –N.3. –P. 402-406.
71. Letsou, A. Viscosity of saturated nonpolar liquids at elevated Pressures / A. Letsou, L.I. Stiel // AIChE Journal. -1973. –V.19. –N. 2. –P. 409-411.
72. Fischer, E.A. Equation of state for substoichiometric urania using significant structures theory / E.A. Fischer // Proc. Intl. Symp. Thermodyn. Nucl. Mater. - 1980. –N.1. –P.115-128.
73. Gillan, M.J. Derivation of an equation of state for liquid uranium dioxide using the theory of significant structures / M.J. Gillan // Proc. Symp. Thermodyn. Nucl. Mater. -1975. –N.1. –P. 269-285.
74. Heckenberger, T. Cubic equations of state for transport properties: An equation for the thermal conductivity of oxygen / T. Heckenberger, K. Stephan // International Journal of Thermophysics. -1990. –V.11. –N. 6. –P.1011-1023.
75. Heckenberger, T. Cubic equations of state for transport properties / T. Heckenberger, K. Stephan // International Journal of Thermophysics. -1991. –V.12. –N. 2. –P. 333-356.
76. Allan, J.M. Correlation and prediction of the viscosity of defined and undefined hydrocarbon liquids / J.M. Allan, A.S. Teja // Can. J. Chem. Eng. -1991. –V.69. N. 4. –P. 986-991.
77. Mehrotra, A.K. A generalized viscosity equation for pure heavy hydrocarbons / A.K. Mehrotra // Ind. Eng. Chem. Res. -1991. -V.30. N. 2. –P. 420-427.
78. Mehrotra, A.K. Generalized one-parameter viscosity equation for light and medium liquid hydrocarbons / A.K. Mehrotra // Ind. Eng. Chem. Res. -1991. -V.30. N. 6. –P. 1367-1372.

79. Aasberg-Petersen, K. Prediction of viscosities of hydrocarbon mixtures / K. Aasberg-Petersen, K. Knudsen, A. Fredenslund // *Fl. Ph. Equilib.* -1991. -V.70. N. 2-3. –P. 293-308.
80. Teja, A.S. Generalized corresponding states method for the viscosities of liquid mixtures / A.S. Teja, P.Rice // *Ind. Eng. Chem. Fundam.* -1981. -V. 20. –N.1. –P. 77-81.
81. Cao, W. Statistical thermodynamic model for viscosity of pure liquids and liquid mixtures / W. Cao, A. Fredenslund, P. Rasmussen // *Ind. Eng. Chem. Res.* - 1992. -V.31. –N. 11. –P. 2603-2619.
82. Mehrotra, A.K. Correlation and prediction of the viscosity of pure hydrocarbons / A.K. Mehrotra // *The Canadian Journal of Chemical Engineering.* - 1994. –V.72. –Issue 3. –P.554-557.
83. Monnery, W.D. Viscosity: A critical review of practical predictive and correlative methods / W.D. Monnery, W.Y. Svrcek, A.K. Mehrotra // *The Canadian Journal of Chemical Engineering.* -1995. –V.73. –Issue 1. –P. 3-40.
84. Qun-Fang, L. Correlation of viscosities of pure liquids in a wide temperature range / L. Qun-Fang, H. Yu-Chun, L. Rui-Sen // *Fl. Ph. Equilib.* -1997. -V.140. N.1–2. –P.221–231.
85. Mehrotra, A.K. A review of practical calculation methods for the viscosity of liquid hydrocarbons and their mixtures / A.K. Mehrotra, W.D. Monnery, W.Y. Svrcek // *Fl. Phase Equilib.* -1996. –V. 117. –N. 1. –P. 344-355.
86. Partington, J.R. The Property of Liquids. In: *An Advanced Treatise on Physical Chemistry* / J.R.Partington // Longmans Green and Co, London. -1951. -Volume 2. –P. 17-28.
87. Фишер, И.З. Статистическая теория жидкостей / И.З. Фишер // М.: Физматгиз. -1961. - 280 с.
88. Zwanzig, R. High frequency elastic module of simple fluids / R.Zwanzig, R. Mountain // *J. Chem. Phys.* – 1965. -V.43. – N.12. –P. 4464-4471.
89. Товбин, Ю.К. Учет наведенных диполей в дискретной модели полярной жидкости / Ю.К. Товбин // *Журнал физической химии.* -2014. -Т. 88. -№ 11. – С. 1752–1765.

90. Кутепов, А.М. Вода. Структура, состояние, сольватация. / А.М. Кутепов // М.:Наука. -2003. -404 с.
91. Кубо, Р. Некоторые вопросы статистической теории необратимых процессов. В сб.: Термодинамика необратимых процессов / Р. Кубо // М.: ИЛ. -1962. -345-421 с.
92. Физика простых жидкостей / Под ред.Темперли Г.,Роулинсона Дж. и Рашбрука Дж. // М:«Мир», часть I, 1971.-308 с.; М.: Мир, часть II. 1973.-400 с.
93. Mori, H. Statistical-mechanical theory of transport in fluids / H. Mori // Phys. Rev. – 1958. – V.112. – N.6. –P.1829-1842.
94. Mori, H. Transport, collective motion, and Brownian motion / H. Mori // Prog. of Theor. Phys. – 1965. – V.33. – N.3. –P.423-455.
95. Зубарев, Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика / Д.Н. Зубарев // М.: Наука. -1971. – 415 с.
96. Nossal, R. Collective motion in simple classical fluids / R. Nossal // Phys. Rev. – 1968. – 166. – №1. –P. 88.
97. Брук-Левинсон, Э.Т. Статистическое вычисление комплексного объемного модуля упругости / Э.Т. Брук-Левинсон, В.Б. Немцов, Л.А. Ротт // Акустический журнал. – 1970. – V.16. – Вып.2. –С. 206-212.
98. Куни, Ф.М. Статистическая теория вязкоупругих свойств жидкостей / Ф.М. Куни // ТМФ. – 1974. – Т.21. – №2. –С.233-246.
99. Luttinger, J.M. Theory of thermal transport coefficient / J.M. Luttinger // Phys. Rev. – 1964. – V.135. – N.6. –P.1505-1514.
100. Мисуркнн, И.А. Электростатическая неоднородность полярной жидкости, теорема Ирншоу и проблема избыточных электронов / И.А. Мисуркнн, С.В. Титов // Химическая физика. -2009, -Т. 28. -№ 3. –С. 50-55.
101. Литинский, Г.Б. Статистическая термодинамика и диэлектрические свойства жидкости диполь-квадрупольных твердых сфер / Г.Б. Литинский // Журнал структурной химии. -2006. -Т. 47. -№ 1. –С.47-53.

102. Литинский, Г.Б. Статистическая термодинамика жидкости дипольных твердых сфер. Модель заторможенного вращения молекул / Г.Б. Литинский // Журнал структурной химии. -2004. -Т. 45. -№ 1. –С.86-93.
103. Литинский, Г.Б. Диэлектрические свойства жидкости дипольных твердых сфер / Г.Б. Литинский // Журнал структурной химии. -2008. -Т. 49. -№ 5. –С. 907-911.
104. Литинский, Г.Б. Квазиодномерная структура полярных жидкостей / Г.Б. Литинский // Известия РАН. Серия физическая. -2009. -Т. 73. -№ 7. –С. 969-971.
105. Литинский, Г.Б. Статистическая термодинамика модельных полярных жидкостей / Г.Б. Литинский // Теплофизика высоких температур. -2010, Т. 48. -№ 1. –С. 32–37.
106. Абдурасулов, А.А. Общие формулы для коэффициентов переноса и соответствующих им модулей упругости в жидкостях с молекулами произвольной формы / А.А. Абдурасулов , М.И. Салахутдинов // Жидкие кристаллы и их практическое использование. -2009. -Т.30. -№ 4. –С. 26-36.
107. Шоайдаров, Н.Б. О вкладе перекрёстных релаксационных процессов в динамические вязкоупругие свойства полярных жидкостей / Н.Б. Шоайдаров // Политехнический вестник. Серия Интеллект. Инновации. Инвестиции. - 2021. -Т.55. -№ 3. –С.22-25.
108. Абдурасулов, Д.А. О динамических вязкоупругих свойствах нематических жидких кристаллов в широком диапазоне изменения частоты возмущения / Д.А. Абдурасулов, А.А.Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Политехнический вестник. Серия: Интеллект. Инновации. Инвестиции. - 2022. -Т.60. -№ 4. –С. 20-24.
109. Бадмаев, Б.Б. Теория резонансного метода определения комплексного модуля сдвига жидкости / Б.Б. Бадмаев, Т.С. Дембелова, Д.Н.Макарова, Е.Д. Вершинина, С.Б. Федорова, А.Н. Машанов // Вестник Бурятского государственного университета. Математика, информатика. -2022. -№ 1. – С.45-55.

110. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика. Том 10. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // Физическая кинетика. М.: Физматлит. -2002. -536 с.
111. Рюмин, А.Н. Второй звук в жидком гелии / А.Н. Рюмин // Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук. -2011. -№ 6. –С.8-14.
112. Полуэктов, Ю.М. Гидродинамика нормальной и сверхтекучей полярных жидкостей. Распространение звука / Ю.М. Полуэктов // Физика низких температур. -2014. -Т. 40. -№ 9. –С.1021-1027.
113. Михайлов, И.Г. Основы молекулярной акустики. / И.Г. Михайлов, В.А. Соловьев, Ю.П. Сырников // - М.: Наука. -1964. -514 с.
114. Литовиц, Т. Структурная и сдвиговая релаксация в жидкостях. [Физическая акустика, 11, часть А. под ред. У. Мэзона] / Т. Литовиц, К. Дэвис // М.: «Мир». -1968. –С. 298-370.
115. Крокстон, К. Физика жидкого состояния / К. Крокстон //- М. Мир. -1978. 400 с.
116. Николаева, О.П. Радиальная функция распределения и скорость звука в плотных газах и жидкостях / О.П. Николаева // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика. Астрономия. -2007. -№ 3. –С.14-17.
117. Кожевников, Е.Н. Критическая анизотропия скорости и поглощения звука в нематическом жидком кристалле / Е.Н. Кожевников // Акустический журнал. -1990. -Т. 36. -№ 3. –С.458-462.
118. Мысик, С.В. Анализ акустических спектров скорости и поглощения звука в амфифильных жидкостях / С.В. Мысик // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. -2015. -№ 3 (225). –С.164-172.
119. Губайдуллин, Д.А. Акустические волны в жидкости с пузырьками газа, покрытыми вязкоупругой оболочкой / Д.А. Губайдуллин, Ю.В. Федоров // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. -2019. -№ 2. –С.126-133.
120. Агишева, У.О. Параметрический анализ режимов ударно-волнового воздействия на газожидкостные среды / У.О. Агишева, Р.Х., Болотнова, В.А.

Бузина, М.Н. Галимзянов // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. -2013. -№ 2. –С.15-28.

121. Дзюба, В.П. Скалярно-векторная и фазовая характеристики акустического поля в произвольной регулярно-неоднородной жидкой среде / В.П. Дзюба, Р.В. Ромашко, Ю.Н. Кульчин // Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки. -2022. -Т. 502. -№ 1. –С.19-23.

122. Желнорович, В.А. Магнитозвуковые волны в намагничивающихся жидкостях / В.А. Желнорович // Журнал технической физики. -2012. -Т. 82. -№ 1. –С.151-155.

123. Губайдуллин, Д.А. Акустика жидкости с пузырьками, покрытыми вязкоупругой оболочкой / Д.А. Губайдуллин, Ю.В. Федоров // Доклады Академии наук. -2018. -Т. 483. -№ 2. –С.148-151.

124. Галимзянов, М.Н. Волновое уравнение для пузырьковой жидкости в переменных Лагранжа / М.Н. Галимзянов, У.О. Агишева // Вестник Башкирского университета. -2019. -Т. 24. -№ 2. –С. 278-284.

125. Губайдуллин, Д.А. Акустические волны в жидкости с газовыми включениями, имеющими жидкую прослойку и вязкоупругую оболочку / Д.А. Губайдуллин, Ю.В. Федоров // Теплофизика высоких температур. -2021. -Т. 59. -№ 4. –С.533-540.

126. Зарифзода, А.К. Процессах распространения звуковых волн в магнитных жидкостях / А.К.Зарифзода // Известия вузов. Физика. -2023. -Т. 66. -№ 5 (786). –С. 34-44.

127. Одинаев, С. Молекулярная теория структурной релаксации и явлений переноса в жидкостях / С. Одинаев, А.А. Адхамов // Душанбе. Дониш. -1998. -230 с.

128. Комилов, К. Статистическая теория релаксационных процессов, явлений переноса, упругих и акустических свойств магнитных жидкостей / К. Комилов, А.К. Зарипов // Душанбе. Издаделство-УГВ «Матбаа». -2018. -208 с.

129. Одинаев, С. Теория релаксационных процессов, явлений переноса, упругих и акустических свойств растворов электролитов / С. Одинаев, Д.М. Акдодов // Душанбе. Издаделство-КВД «Матбаа». -2022. -190 с.
130. Odinaev, S. Study of frequency dispersion of shear and bulk viscosity coefficients for liquid argon, krypton and xenon under different parameters of state / S. Odinaev, D. Akdodov, Kh. Mirzoaminov // Journal of Molecular Liquids. - 2011. -V.164. –N. 1-2. -P. 22–28.
131. Odinaev, S. Dispersion of dynamic modules of elasticity of simple liquids for different types of decay of flow relaxations / S. Odinaev, A. Abdurasulov // Journal of Molecular Liquids. – 2012. – V.176. – P.79-85.
132. Одинаев, С. Частотная дисперсия динамических модулей упругости растворов электролитов / С. Одинаев, Д.М.Акдодов, Н. Шарифов // Журнал физической химии. - 2016. -Т. 90. -№ 2. –С.294-299.
133. Одинаев, С. Зависимость частотной дисперсии коэффицента объемной вязкости растворов электролитов от природы затухания релаксирующих потоков / С. Одинаев, Д.М. Акдодов // Журнал физической химии. - 2016. - Т.90. -№ 6. –С.877-884.
134. Акдодов, Д.М. Исследование области частотной дисперсии коэффициентов вязкостей растворов электролитов с учетом обобщенного потенциала взаимодействия / Д.М. Акдодов // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. -2017. -№1/1. – С.111-115.
135. Одинаев, С. Исследование частотной дисперсии динамических модулей упругости растворов электролитов на основе обобщенного потенциала ионно-молекулярных систем / С. Одинаев, Д.М. Акдодов, Н. Шарифов // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. -2020. -№1. –С. 118-130.
136. Одинаев, С. Исследование частотной дисперсии акустических параметров водных растворов электролитов, когда потоки затухают по экспоненциальному закону / С. Одинаев, Д.М. Акдодов, А.Д. Саркорова // Вестник филиала Московского государственного университета имени М.В.

- Ломоносова в городе Душанбе, Серия естественных наук. -2023. -Т. 1, - №1(29). -С.67-76.
137. Боголюбов, Н.Н. Избранные труды по статистической физике / Н.Н. Боголюбов // М.: Изд-во МГУ. -1979. -343 с.
138. Климонтович, Ю.Л. Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы / Ю.Л. Климонтович // М.: Наука. -1975. -352 с.
139. Боголюбов, Н.Н. Микроскопические решения уравнения Больцмана–Энскога в кинетической теории для упругих шаров / Н.Н. Боголюбов // Теоретическая и математическая физика. 1975, Т. 24. № 2. –С. 242–247.
140. Chester, G.V. The theory of irreversible processes / G.V. Chester // Rep. on Progress in Physics. -1963. -V. 26. –P.411.
141. Cohen, E.G.D. The kinetic theory of fluids-an introduction / E.G.D. Cohen // Physics Today. -1984. V. 37. N.1. –P. 64–73.
142. Азнакаев, Э.Г. Исследования явления переноса в плотных однокомпонентных системах / Э.Г. Азнакаев //Физика низких температур. - 1979. -Т. 5. -№10. –С.1200-1211.
143. Ландау, Л.Д. Гидродинамика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // М.: Наука. -1988. -736 с.
144. Корнфельд, М.Н. Упругость и прочность жидкостей / М.Н. Корнфельд // М.: Гостехиздат. -1951. –С.193.
145. Odinaev, S. Determination of the frequency dispersion region of the transport coefficients of classical liquids depending on the character of attenuation of relaxing flows / S. Odinaev // Ukr. J. Phys. - 2011. - V. 56, № 8. –P.784-790.
146. Гиршфельдер, Дж. Молекулярная теория газов и жидкостей / Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд // М.: ИЛ. -1961. -930 с.
147. Каплан, И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И.Г. Каплан // - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. -2012. -394 с.
148. Осипов, О.А. Справочник по дипольным моментам / О.А. Осипов, В.И. Минкин, А.Д. Гарновский // М: «Высшая школа». -1971. –С.416.

149. Юхновский, И.Р. Статистическая теория классических равновесных систем / И.Р. Юхновский, М.Ф. Головкин // Киев: Наукова думка. -1980. – С.372 с.
150. Wertheim, M.S. Exact solution of the Percus-Yevick integral equation for hard spheres / M.S. Wertheim // Phys. Rev. Lett. -1963. V.10. -№ 8. –P. 321-323.
151. Smith, W.R. Analytical representation of the Percus-Yevick hard sphere radial distribution function / W.R. Smith, D.J. Henderson //– Mol. Phys., -1970. -V.19. - № 3. –P.441-446.
152. Musharaf, A.S. Mode coupling theory of self and cross diffusivity in a binary fluid mixture: Application to Lennard-Jones systems / A.S. Musharaf, S. Alok, G.K. Swapan // Journal of Chemical Physics. – 2001. – V.114. – N.23. –P.10419-10429.
153. Рид, Р. Свойства газов и жидкостей / Р. Рид, Т. Шервуд //– Л:«Химия». - 1971. -709 с.
154. Herreman, W. Shear viscosity measurements of liquid carbon dioxide / W. Herreman, W. Grevendonk, A.De. Bock // The Journal of Chemical Physics. - 1970. -V.53. -N 1. –P.185 – 189.
155. Boon, J.P. On the principle of corresponding states for the viscosity of simple liquids / J.P. Boon, J.C. Legros, G. Thomaes // Physica. – 1967. – V.33. –P. 547–557.
156. Варгафтик, Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей / Н.Б. Варгафтик // М: «Наука». -1972. - 720 с.
157. Зацепина, Г.Н. Свойства и структура воды / Г.Н. Зацепина // М: Издательство МГУ. -1974. -168 с.
158. Робинсон, Р. Растворы электролитов / Р. Робинсон, Р. Стокс // М.: ИЛ. - 1963. - 646 с.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

***Статьи, опубликованные в научных журналах, рекомендованных ВАК
при Президенте Республики Таджикистан***

[1-А] Баладжонзода, С.Д. Частотная дисперсия вязкоупругих свойств полярных жидкостей в случае экспоненциального закона затухания

релаксирующих потоков / С.Одинаев, Д.М. Акдодов, С.Д.Баладжонзода // Известия НАН Таджикистана. Отдел. физ.-мат., хим., геол. и тех. наук, 2024.- №1(194).-С. 41-49.

[2-А] **Баладжонзода, С.Д.** Структурная релаксация и вязкоупругих свойств полярных жидкостей / Д.М Акдодов., С.Д.Баладжонзода // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук, 2025.- №1.-С.126-138.

[3-А] **Баладжонзода, С.Д.** Численный расчет зависимости вязкоупругих свойств полярных жидкостей от параметров состояния / Д.М Акдодов., С.Д.Баладжонзода // Доклады НАН Таджикистана, 2025.-Т.68.-№4.-С.372-380.

[4-А] **Баладжонзода, С.Д.** Исследование зависимости вязкоупругих свойств многоатомных жидкостей от термодинамических параметров состояния / Д.М Акдодов., С.Д.Баладжонзода // Политехнический вестник. Серия: интеллект. инновации. Инвестиции. -2025. -№ 2 (70). -С.27-34.

[5-А] **Баладжонзода, С.Д.** Исследование акустических свойств многоатомных и полярных жидкостей /Д.М Акдодов., С.Д.Баладжонзода // Вестник Дангаринского государственного университета. Серия естественных наук. -2025. -№ 2 (31). -С.52-65.

Статьи, опубликованные в других научных журналах,

[6-А] **Баладжонзода, С.Д.** Исследования сдвиговой вязкости полярных жидкостей с учетом релаксационных процессов / С.Д.Баладжонзод // Молодой исследователь, 2022.-№1.-С.319-323.

Публикации в материалах научных конференций

[7-А] **Баладжонзода, С.Д.** Исследования вязкостных свойства полярных жидкостей от термодинамических параметров состояния / С.Д.Баладжонзод // The issue contains 6th International Scientific and Practical Conference «Science, Education, Innovation: Topical Issues and Modern Aspects». Scientific collection interconf, 2022, №104. (April 16-18, 2022). -Tallinn, -Estonia. P.250-254.

[8-А] **Балачонзода, С.Д.** Хосиятҳои часпакии моеъҳои кутбӣ аз параметрҳои термодинамикии ҳолат /С.Д. Балачонзода // Материалы

Республиканской научно-практической конференции «Взаимосвязь науки с производством в процессе ускоренной индустриализации республики Таджикистан», Част 1., Душанбе, 2022, (22-23 апреля 2022г.) С.129-131.

[9-А] **Балачонзода, С.Д.** Таҳқиқи коэффиенти часпакии моеъҳои кутбӣ бо саҳми равандҳои релаксационӣ / С. Одинаев, С.Д. Балачонзода // Материалы республиканской научно-практической конференции на тему «Математические и компьютерные моделирование физических процессов» посвященной 20-летию изучения и развития естественных, точных и математических дисциплин в сфере науки и образования, Душанбе, 9 февраля 2023 года, 47-51.

[10-А] **Баладжонзода, С.Д.** Исследование вязкостные свойства полярных жидкостей с учетом релаксационных процессов / С. Одинаев, Д.М.Акдодов, С.Д.Баладжонзода// Сборник материалов Международной научно-практической конференции «Новые достижения в области естественных наук и информационных технологии», посвященной «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук на 2020-2040 гг.». Душанбе: изд-во «РТСУ», 2023, (30 май 2023г.), с. 84-86.

[11-А] **Баладжонзода, С.Д.** Исследование частотной дисперсии динамических модулей упругости полярных жидкостей в случае экспоненциального закона затухания релаксирующих потоков / С. Одинаев, Д.М.Акдодов, С.Д.Баладжонзода// Материалы международной научно-практической конференции на тему «Современные проблемы физики и химии полимеров», посвященной «75-летию образования Таджикского национального университета» и «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 годы)», Душанбе, 10 октября 2023, с.134-138.

[12-А] **Баладжонзода, С.Д.** Расчет скорости распространения звука в полярных жидкостях / Д.М.Акдодов, С.Д.Баладжонзода // Республиканскую научно-практическую конференцию «Проблемы и тенденции развития точных, математических и естественных наук», посвященной двадцатилетию

изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 гг.). 28 мая 2024 года. с. 296-299.

[13-А] **Баладжонзода С.Д.** Исследование частотной дисперсии коэффициента поглощения звука полярных жидкостей / Д.М.Акдонов, С.Д.Баладжонзода // Республиканская научно-практическая конференция «Актуальные проблемы физики конденсированного состояния», посвященная 35-летию государственной независимости Республики Таджикистан и «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования», 80-летию профессора Шерматова М., 85-летию профессора Джамолова М. Худжанд. 20-21 мая 2024. с. 27-30.

[14-А] **Баладжонзода, С.Д.** Вязкоупругие свойства полярных жидкостей в случае степенного закона затухания релаксирующих потоков / Д.М.Акдонов, С.Д.Баладжонзода // Материалы международной научной конференции «Физические и технические науки в пространстве СНГ: проблемы и перспективы развития», 29–30 ноября 2024. с. 51-55.

[15-А] **Баладжонзода, С.Д.** Релаксационные процессы и вязкоупругих свойств полярных жидкостей / Д.М.Акдонов, С.Д.Баладжонзода // Материалы международной научно-практической конференции «Проблемы и перспективы развития физических наук», Худжанд, 11-12-уми март 2025. с. 226-231.

[16-А] **Баладжонзода, С.Д.** Зависимость вязкостных свойств многоатомных жидкостей от параметров состояния / Д.М.Акдонов, С.Д.Баладжонзода // Материалы международной научно-практической конференции на тему «Современные проблемы физики полупроводников и диэлектриков», посвящённой «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в 2020-2040гг» в области науки и образования и «35-летию кафедры физической электроники». Душанбе, 30 апреля 2025. с. 114-119.