На правах рукописи

УДК: 532.2; 534.7.

Шоайдаров Насратшо Бороншоевич

МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ВЯЗКОУПРУГИХ СВОЙСТВ ОДНОАТОМНЫХ И МНОГОАТОМНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Специальность: 1.3.8 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Душанбе 2022

Работа выполнена в секторе теоретической физики Физико-технического института им. С.У.Умарова НАН Таджикистана.

Научный руководитель:	**Абдурасулов Анвар Абдурасулович** - кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Таджикского технического университета им. академика М.С.Осими.
Официальные оппоненты:	**Ульянов Сергей Владимирович** - доктор физико-математических наук, профессор кафедры статистической физики Санкт-Петербургского государственного университета. **Махмадбегов Рашидджон Саидвалибегович** – кандидат физико-математических наук, декан естественнонаучного факультета Межгосударственного образовательного учреждения высшего образования Российско-Таджикского (Славянского) университета.
Ведущая организация:	ФГБОУ ВО «Восточно - Сибирский государственный университет технологий и управления» (г. Улан-Уде, Россия).

Защита состоится «**7**» **марта 2023 г. в 10:00 часов** на заседании объединённого диссертационного совета 99.0.057.02 по защите докторских и кандидатских диссертаций при Таджикском национальном университете по адресу: 734025, Республика Таджикистан, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17, факс (992-372) 21-77-11. Зал заседаний Диссертационного совета ТНУ.

Отзывы направлять по адресу; 734025, Республика Таджикистан, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17, ТНУ, диссертационный совет 99.0.057.02, E.mail: tgnu@mail.tj.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Таджикского национального университета (www.tnu.tj).

Автореферат разослан «_____» _____ 2023 г.

Учёный секретарь объединённого
диссертационного совета 99.0.057.02,
кандидат физ.-мат. наук, СНС Табаров С.Х.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Жидкое состояние является одним из самых распространённых и широко используемых состояний вещества. Основным характерным свойством жидкостей является их текучесть. Поэтому при их практическом применении во многих случаях на первый план выходит необходимость знания определяющих их текучесть вязкоупругих свойств.

При технической эксплуатации и в естественных условиях жидкости подвергаются различного рода внешним воздействиям, вследствие чего в большинстве случаев находятся в неравновесном динамическом состоянии. Исследования показывают, что свойства и значения вязкоупругих параметров жидкостей в условиях высокоинтенсивных и высокочастотных динамических процессов существенно отличаются от аналогичных в медленных и равновесных процессах и зависят, как от частоты внешнего возмущения, так и от природы происходящих в них внутренних релаксационных процессов. Естественно, что теоретическое исследование динамических вязкоупругих свойств жидкостей с учётом особенностей их молекулярной структуры и вкладов, происходящих в них внутренних релаксационных процессов можно успешно проводить только на основе строгих методов статистической теории жидкого состояния.

Исходя из этого, обобщение и развитие молекулярно-статистической теории динамических процессов в жидких системах, изучение и анализ механизмов, происходящих в них внутренних релаксационных процессов, определение вклада последних в динамические вязкоупругие свойства жидкостей в широком диапазоне изменения параметров состояния и частоты внешнего возмущения является актуальной задачей теории жидкого состоя-ния и определяют основное содержание настоящей диссертационной работы.

Состояние вопроса. Несмотря на существующие трудности, молекулярно-статистическая теория жидкостей успешно развивается. Замет-ные результаты достигнуты в статистической теории равновесного состояния жидкостей [1,2], где в общем виде решена проблема определения связи между равновесными термодинамическими параметрами жидкостей с особенностями их молекулярной структуры.

Сформулирована и развиваеттся в нескольких направлениях и теория неравновесных процессов в жидкостях [2-4]. В представлении жидкостей, как рыхлых твёрдых тел, получило широкое развитие «дырочная» теория или теория «свободного объёма» жидкостей в различных вариантах [3].

С обнаружением в жидкостях ближнего радиального порядка стали бурно развиваться теория коррелятивных функций и связанный с ней метод кинетических уравнений [4].

В последние годы, наряду с другими статистическими методами, для описания неравновесных свойств жидких систем успешно применяется метод неравновесных функций распределения (МНФР) молекул [5]. По мнению многих исследователей, этот метод не содержит ограничений, присущих другим методам молекулярно-статистического описания неравновесных свойств жидкостей, и его можно применять для описания сложных асимметричных жидких систем [6]. Вместе с тем, многие вопросы статистической теории динамических необратимых процессов в жидкостях, особенно в сложных многоатомных жидких системах, до сих пор остаются открытыми. Развитые для простых жидкостей статистические теории не могут учитывать связанные с формой и ориентацией молекул свойства сложных жидкостей.

В связи с этим основной целью настоящей диссертационной работы является обобщение и использование метода МНФР для исследования динамических вязкоупругих свойств сложных многоатомных жидкостей с учётом угловых ориентаций молекул и вкладов, происходящих в жидкостях внутренних термических релаксационных процессов в широком диапазоне изменения термодинамических параметров состояния и частоты внешнего возмущения.

Для достижения этой цели были сформулированы следующие основные задачи:

-**коррекция** обобщённого для описания сложных асимметричных жидкостей метода НФР для исследования динамических вязкоупругих свойств многоатомных жидкостей;

-**вывод** замкнутой системы уравнений обобщённой (релаксационной) гидродинамики для описания динамических вязкоупругих свойств сложных многоатомных жидкостей;

-**определение** общих аналитических выражений для динамических коэффициентов вязкостей и соответствующих им динамических модулей упругости, корректно учитывающих вклады структуры и характера происходящих в жидкостях внутренних термических релаксационных процессов;

-**выбор** равновесных параметров, **создание** алгоритмов вычисления на ЭВМ и **проведение** численных расчётов зависимостей динамических вязкоупругих параметров конкретных моделей одноатомных, двухатомных и многоатомных жидкостей от термодинамических параметров состояния и частоты внешнего возмущения.

Объектами исследования являются динамические вязкоупругие свойства одноатомных и многоатомных жидкостей.

В качестве основных методов исследования были избраны метод НФР, методы численных расчётов на ЭВМ и другие методы.

Научная новизна результатов заключается в том, что впервые:

-**получена** замкнутая система уравнений обобщённой гидродинамики для компонент тензоров вязких напряжений, позволяющая исследовать динамические вязкоупругие свойства многоатомных жидкостей с учётом вкладов происходящих в них термических релаксационных процессов;

-**проведён** детальный анализ молекулярных механизмов внутренних термических релаксационных процессов в многоатомных жидкостях;

-**установлено,** что все происходящие в рассматриваемой модели релаксационные процессы протекают по трём основным механизмам-трансляционному (τ_{tt}), вращательному (τ_{rr}) и интерференционному (τ_{tr});

-**получены** упрощённые аналитические выражения для динамических вязкоупругих параметров жидких систем, в которых обмен энергией между одинаковыми степенями свободы молекул происходит гораздо быстрее, чем обмен энергией между различными степенями свободы (т.е. при $\tau_{tt}, \tau_{rr} \ll \tau_{tr}$);

-**показано**, что полученные результаты с учётом только трансляционных релаксационных процессов удовлетворительно описывают динамические вязкоупругие свойства простых одноатомных жидкостей;

-**исследованы** динамические вязкоупругие свойства жидких систем, где обмен энергией между различными степенями свободы происходит быстрее, чем обмен энергией между одинаковыми степенями свободы, т.е. когда ($\tau_{tt}, \tau_{rr} \gg \tau_{tr}$);

-**получены** упрощённые аналитические выражения, учитывающие вклады всех трёх релаксационных процессов и позволяющие описать динамические вязкоупругие свойства сложных многоатомных жидкостей;

-**изучено** асимптотическое поведение динамических вязкоупругих параметров жидкостей при предельно низкочастотных и предельно высокочастотных динамических процессах;

-**показано**, что при низкочастотных процессах ($\nu\tau \to 0$) динамические вязкоупругие свойства жидкостей описываются низкочастотными значениями коэффициентов вязкостей, а при высокочастотных процессах ($\nu\tau \to \infty$) значениями высокочастотных модулей упругости жидкости;

-**установлено**, что в одноатомных жидкостях имеет место одна релаксационная область с характерным временем релаксации τ_{tt}, а в многоатомных жидкостях имеет место, как минимум, две релаксационные области с характерными временами релаксации τ_{tr} и $\tau_{эф} = 10\tau_{tr}{}^{2}(\tau_{tt} + \tau_{rr})\ \ 3\,\tau_{tt}\tau_{rr}$.

-**составлен** алгоритм и проведены численные расчёты зависимости динамических вязкоупругих параметров одноатомного жидкого аргона,

неполярных жидких азота и кислорода и полярных воды и жидкого амиака от температуры и плотности;

-**выявлена** определяющая роль взаимодействия молекул в формировании динамических вязкоупругих свойств всех типов рассматриваемых моделей жидкостей;

Практическая значимость результатов подтверждается возможностью их использования для оценки значений вязкоупругих и других теплофизических характеристик простых и многоатомных жидкостей при различных динамических процессах. Полученные численные результаты расширяют базу данных о вязкоупругих свойствах рассмотренных жидкостей в различных условиях эксплуатации. Аналитические выражения и численные значения коэффициентов внутреннего трения и характерных времён релаксации могут быть использованы для анализа и определения и других теплофизических параметров простых и многоатомных жидкостей, в том числе акустических параметров. Материалы диссертации могут быть исполь-зованы докторантами, аспирантами, соискателями, магистрами и студентами старших курсов физических, физико-химических и технологических специальностей при выполнении научных и дипломных работ.

Выносимые на защиту положения:

-замкнутая система уравнений обобщённой (релаксационной) гидродинамики для компонент тензоров напряжений, обусловленных поступательными (t) и вращательными (r) степенями свободы несферических молекул и их взаимодействием (tr, rt);

-общие и упрощённые аналитические выражения для динамических коэффициентов вязкости и динамических модулей упругости, корректно учитывающих особенности структуры и вклады происходящих в одноатомных и многоатомных жидкостях внутренних термических релаксационных процессов;

-аналитические выражения и результаты исследования молекулярных механизмов внутренних термических релаксационных процессов, происходящих в простых и многоатомных жидкостях;

-асимптотическое поведение динамических вязкоупругих параметров многоатомных жидкостей в областях с предельно высокими и предельно низкими частотами внешнего возмущения;

-алгоритм вычислений и результаты численного расчёта зависимости динамических вязкоупругих параметров аргона, азота, кислорода, аммиака и воды от температуры, плотности и частоты внешнего возмущения.

Достоверность результатов обеспечивается высокой корректностью исходных линейных и нелинейных уравнений обобщённой (релаксацион-

ной) гидродинамики и использованных методов их решений, а также хорошим согласием с экспериментом.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы изложены на: Международной научной конференции «Физика конденсированного состояния» (Душанбе , 2004); 3rd International Conference PLMMP (Kyiv, 2005); международной конференции «Физика конденсированного состояния и экологических систем» (Душанбе 2004, 2006); научно-теоретической конференции «Современные проблемы физики и астрофизики», посвящённой 100-летию СТО Эйнштейна и 40-летию физического факультета ТГНУ (Душанбе, 2005); международной конференции «Вклады Авиценны и Эйнштейна в развитии естествознания», посвящённой 100-летию СТО Эйнштейна (Курган-Тюбе, Таджикистан, 2005); научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава Таджикского государственного национального университета (Душанбе, 2006); III международной научно-практической конференции «Перспективы развития науки и образования в XXI веке» (ТТУ, Душанбе 2008); V международной конференции «Современные проблемы физики» (Душанбе, 2011); VIII международной научно-практической конференции «Перспективы развития науки и образования» (ТТУ, Душанбе, 2016); республиканской научно-практической конференции «Проблемы металлургии Таджикистана и пути их решения» (Душанбе, 2016); научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ «Вода для устойчивого развития, 2018-2028 годы» (Душанбе 2018); VI международной конференции «Современные проблемы физики (Душанбе, 2018); международной научно-практической конференции «Энергетика Таджикистана: актуальные проблемы и пути их решения» (Филиал МЭИ, Душанбе, 2019); международной научно-практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана. Проблемы энергосбережения, энергоэффективности и использования возобновляемых источников энергии» (филиал МЭИ, Душанбе, 2021); международной научно-практической конференции «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития» (ТТУ, Душанбе,2021); научных физических семинарах Таджикского национального университета, Физико-технического института имени С.У.Умарова НАН Таджикистана, Таджикского технического университета имени академика М.С.Осими.

Личный вклад соискателя является определяющим в сборе информации, составлении обзора, проведении численных расчётов и оформления диссертации. Часть систем уравнений обобщённой гидродинамики, позволяющей исследовать динамические вязкоупругие свойства многоатомных жид-

костей, общие аналитические выражения для динамических коэффициентов вязкостей и динамических модулей упругости получены диссертантом.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 18 работах, 4 из которых в журналах из Перечня ВАК РФ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка цитированной литературы. Работа изложена на 123 страницах машинописного текста, включая 20 рисунков, 12 таблиц и список литературы из 128 наименований.

Ключевые слова: простые и многоатомные жидкости, вязкоупругие свойства, релаксация, трансляционные и вращательные степени свободы, неравновесная функция распределения, радиальная структура, потенциал парного взаимодействия.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы исследования, определены цели и задачи диссертационной работы, дана оценка изученности исследуемых в диссертации проблем, сформулированы научная новизна и практическая значимость полученных результатов.

В первой главе приведён литературный обзор по экспериментальному и теоретическому исследованию вязкоупругих свойств жидкостей. Основное внимание уделено тем экспериментальным и теоретическим работам, в которых рассматриваются вклады термических релаксационных процессов в вязкоупругие свойства жидкостей.

Во второй главе приведены основные понятия и принципы статистического описания сложных жидких систем. Рассматривается жидкая система, состоящая из N одинаковых, жёстких молекул произвольной формы с массами m и моментом инерции $I_{\alpha\beta}$. Полагается, что такие молекулы имеют только поступательные и вращательные степени свободы, которых можно описать законами классической физики. Для определения положения таких несферических молекул в фазовом пространстве, используются наборы декартовых $x_i\{x_i; y_i; z_i\}$ и угловых $\theta_i\{\theta_i; \phi_i; \psi_i\}$ координат (например, углы Эйлера), а также соответствующие им проекции импульса $p_i\{p_{xi}; p_{y_i}; p_{z_i}\}$ и собственного момента импульса молекулы жидкости $M_i\{M_{xi}; M_{y_i}; M_{z_i}\}$.

Микроскопическая модель жидкой системы задается гамильтонианом

$$H(x_i, \theta_i, P_i, M_i) = \ {}_{i=1}^{N} \ \frac{P_i^2}{2m} + \frac{M_i^{\alpha} M_i^{\beta}}{2I_{\alpha\beta}} + \frac{1}{2} \ {}_{i\neq j=1}^{N} \Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_i, \theta_j) \ , \qquad (1)$$

где $\Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_i, \theta_j)$ - парный, но несферический потенциал взаимодействия i-й и j-й молекулы жидкости. В качестве уравнения движения молекул исполь-

зуется уравнении движения в Гамильтоновой форме.

Неравновесное динамическое состояние жидкой системы в 12N- мерном фазовом пространстве определяется набором плотностей динамических величин

$$P_m(x,\theta) = \ {}_{i=1}^{N} P_{mi}\, \delta(x - x_i)\delta(\theta - \theta_i), \qquad (2)$$

где P_{mi} – молекулярное выражение $P_m(x,\theta)$; $\delta(x - x_i)$ -дельта функция Дирака.

Уравнения изменении этих динамических величин по времени, имеют вид известных законов сохранения

$$\frac{\partial P_m(x,\theta)}{\partial t} + \nabla J_m(x,\theta) = I_m(x,\theta), \qquad (3)$$

где $J_m(x,\theta)$ - динамические плотности потоков соответствующих величин, а $I_m(x,\theta)$ – соответствующие плотности источников производства этих величин. Если $P_m(x,\theta)$ динамическая плотность сохраняющихся величин, то $I_m\ x,\theta\ = 0$.

Чтобы из уравнения (3) получить уравнения обобщённой гидродинамики и исследовать неравновесные динамические свойства жидких систем, необходимо усреднять их по соответствующему неравновесному статистическому ансамблю [6].

Исходя из этих общих принципов и предположений во втором разделе второй главы формулируется замкнутая система уравнений временной эволюции динамических величин, характеризующих неравновесное состояние рассматриваемой модели жидкой системы. Здесь для описания неравновесного состояния сложных многоатомных жидкостей, наряду с динамическими плотностями таких общих для всех жидкостей сохраняющихся величин, как плотность энергии и плотность числа частиц, используются ещё и динамические плотности компонент векторов потоков частиц $J_t^{\alpha}\ x,\theta$, $J_r^{\beta}(x,\theta)$, потоков энергии $S_t^{\alpha}\ x,\theta$, $S_r^{\alpha}\ x,\theta$, тензора потоков импульса и момента импульса $P_t^{\alpha\beta}\ x,\theta$,$P_r^{\alpha\beta}\ x,\theta$, $P_{tr}^{\alpha\beta}\ x,\theta$, обусловленные поступательными (t), вращательными (r) степенями свободы молекул и их взаимодействием (tr).

Поскольку вязкоупругие свойства жидкостей в основном обусловлены переносом количества движения, приведём здесь только явные выражения тензоров переноса импульса и момента импульса молекул

$$P_t^{\alpha\beta}\ x,\theta\ = \ {}_{i=1}^{N}\ \frac{P_i^{\alpha}P_i^{\beta}}{m} + \frac{1}{2}\ {}_{i\neq j=i}^{N} F_{ij}^{\alpha} X_{ij}^{\beta}\ \delta\ x_i - x\ \delta\ \theta_i - \theta$$

$$P_r^{\alpha\beta}(x,\theta) = \ {}_{i=1}^{N}\ \frac{M_i^{\alpha}M_i^{\gamma}}{I_{\beta\gamma}} + \frac{1}{2}\ {}_{i\neq j=i}^{N} N_{ij}^{1\alpha}\, b_i^{\beta\gamma}\theta_{ij}^{\gamma}\ \ \delta(x_i - x)\delta(\theta_i - \theta) \qquad (4)$$

$$P_{tr}^{\alpha\beta}(x_i\theta) = \ {}_{i=1}^{N}\frac{P_i^{\alpha}M_i^{\gamma}}{I_{\beta\gamma}}\delta(x_i - x)\delta(\theta_i - \theta), \quad P_{rt}^{\alpha\beta}\ x_i\theta\ = \frac{I_{\beta\gamma}}{m}P_{tr}^{\alpha\beta}\ x,\theta\ .$$

Дифференцируя выражения динамических величин по времени, получим незамкнутую цепочку уравнений эволюции динамических плотностей величин, характеризующих неравновесное состояние жидкости, которые

имеют вид законов сохранения (3). Чтобы замкнуть эту систему уравнений, выражаем тензора третьего ранга через тензоров первого ранга $S^{\alpha\beta\gamma} \approx \frac{1}{5}\ S_t^{\alpha}\delta_{\beta\gamma} + S_t^{\beta}\delta_{\alpha\gamma} + S_t^{\gamma}\delta_{\alpha\beta}$.

В третьем разделе второй главы усреднением системы уравнений эволюции динамических величин по НФР [6], пренебрежением вкладов диффузионных и термоупругих процессов в вязкоупругие свойства жидкости (полагая $j_t^{\alpha}, j_r^{\alpha}, S_t^{\alpha}, S_r^{\alpha} \equiv 0$) и переходом от компонент тензоров переноса импульса $\mathrm{P}^{\alpha\beta}$ к компонентам тензоров напряжений ($\sigma^{\alpha\beta}$) согласно выражению $\sigma^{\alpha\beta} = -\mathrm{P}^{\alpha\beta} + \mathrm{P}\delta^{\alpha\beta}$, в линейном приближении по отклонениям термодинамических параметров от их равновесного значения получена система уравнений обобщёной гидродинамики, позволяющая исследовать динамические вязкоупругие свойства многоатомных жидкостей в виде:

$$\frac{\partial \sigma_t^{\alpha\beta}\ x,\theta,t}{\partial t} = I_t^{\alpha\beta}\ x,\theta,t\ + A_t^{\alpha\beta}\ x,\theta,t\ ; \tag{5}$$

$$\frac{\partial \sigma_r{}^{\alpha\beta}\ x,\theta,t}{\partial t} = I_r^{\alpha\beta}\ x,\theta,t\ + A_r^{\alpha\beta}\ x,\theta,t\ ; \quad \frac{\partial \sigma_{tr}^{\alpha\beta}(x,\theta,t)}{\partial t} = \quad I_{tr}^{\alpha\beta}.$$

Здесь: $I_t^{\alpha\beta}, I_r^{\alpha\beta}$ и $I_{tr}^{\alpha\beta}$ – релаксационные источники изменения тензоров $\sigma^{\alpha\beta}$; а

$$A_t^{\alpha\beta} = -\ P_t - \frac{P_t}{2c_V}\ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _n\ \frac{\partial u^{\alpha}(x,t)}{\partial x^{\beta}} - \frac{5}{2}P_t - n\ \frac{\partial P_t}{\partial n}\ _T - \frac{(e+P_t)}{c_V}\ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _n\ \delta^{\alpha\beta}\ \frac{\partial u^{\gamma}(x,t)}{\partial x^{\gamma}} +$$
$$-\ P_t - n\ \frac{\partial P_t}{\partial n}\ _T - \frac{e}{c_V}\ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _n\ \delta^{\alpha\beta}\frac{\partial(a^{\gamma\rho}\omega^{\rho}(x,t))}{\partial\theta^{\gamma}} - \frac{P_t}{c_V}\ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _n\ \frac{\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}}{2}(rotu)^{\gamma} \tag{6}$$

$$A_r^{\alpha\beta} = -\frac{P_r}{2c_V}\ \frac{\partial P_r}{\partial T}\ _n\ \frac{\partial u^{\alpha}(x,t)}{\partial x^{\beta}} - P_r - n\ \frac{\partial P_r}{\partial n}\ _T - \frac{(e+P_t)}{c_V}\ \frac{\partial P_r}{\partial T}\ _n\ \delta^{\alpha\beta}\ \frac{\partial u^{\gamma}(x,t)}{\partial x^{\gamma}} -$$
$$-\ P_r - n\ \frac{\partial P_r}{\partial n}\ _T + \frac{e}{c_V}\ \frac{\partial P_r}{\partial T}\ _n\ \delta^{\alpha\beta}\frac{\partial(a^{\gamma\rho}\omega^{\rho}(x,t))}{\partial\theta^{\gamma}} - \frac{P_t}{c_V}\ \frac{\partial P_r}{\partial T}\ _n\ \frac{\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}}{2}(rotu)^{\gamma}$$

- их соответствующие гидродинамические источники;

$$e(T,\rho) = 3nk_{\text{Б}}T + \frac{n^2}{2}\ \ \Phi_{ij}(x_{ij},\theta_{ij})g_o(x_{ij},\theta_{ij})dx_{ij}d\theta_{ij}\ , \tag{7}$$

$$\begin{matrix} P_t\ \ T,n \\ P_r(T,n) \end{matrix} = nk_{\text{Б}}T - \frac{n^2}{6}\ \begin{matrix} \frac{\partial\Phi_{ij}\ x_{ij},\theta_{ij}}{\partial x_{ij}}x_{ij} \\ B\frac{\partial\Phi_{ij}(x_{ij},\theta_{ij})}{\partial\theta_{ij}}\theta_{ij} \end{matrix}\ \ g_o(x_{ij},\theta_{ij})dx_{ij}d\theta_{ij} \tag{8}$$

-плотность внутренней энергии и давления жидкости, которые являются калорическими и термическими уравнениями состояния жидкости.

Подставляя (6) в (5), имея в виду что в локально-равновесном приближении $I^{\alpha\beta}\ x,\theta\ _t = 0$), с учётом $u^{\alpha}\ x,t\ = \frac{\partial S^{\alpha}\ x,t}{\partial t}$, $\omega^{\alpha}\ x,t\ = \frac{\partial\Omega^{\alpha}\ x,t}{\partial t}$, где S^{α} и Ω^{α}-пространственное и угловое смещения (деформации) элемента жидкости (опуская по обе стороны равенства производные по времени), принимая коэффициенты при $\frac{\partial S^{\gamma}(x,t)}{\partial x^{\gamma}}$ и $\frac{\partial\ a^{\gamma\rho}\Omega^{\rho}\ x,t}{\partial\theta^{\gamma}}$ как соответствующие модули упругости, находим

$$\mu_{s,t}^{\infty} = P_t\ \ 1 - \frac{1}{c_V}\ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _n\ , \quad \mu_{V,t}^{\infty} = P_t\ \frac{5}{2} - \frac{n}{P_t}\ \frac{\partial P_t}{\partial n}\ _T - \frac{(e+P_t)}{P_t c_V}\ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _n$$
$$\mu_{V,t}^{\text{в}\infty} = P_t\ \ 1 - \frac{n}{P_t}\ \frac{\partial P_t}{\partial n}\ _T - \frac{e}{P_t c_V}\ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _n\ , \quad \mu_{s,t}^{\text{в}\infty} = \frac{P_t}{2c_V}\ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _n \tag{9}$$

$$\mu_{V,r}^{\infty} = P_r \;\; 1 - \frac{n}{P_r} \;\; \frac{\partial P_r}{\partial n} \;\; {}_T - \frac{e+P_t}{P_r c_V} \;\; \frac{\partial P_r}{\partial T} \;\; {}_n \;, \qquad \mu_{S,r}^{\text{в}\infty} = \frac{P_r}{2c_V} \;\; \frac{\partial P_t}{\partial T} \;\; {}_n$$

$$\mu_{V,r}^{\text{в}\infty} = P_r \;\; 1 - \frac{n}{P_r} \;\; \frac{\partial P_r}{\partial n} \;\; {}_T + \frac{e}{P_r c_V} \;\; \frac{\partial P_r}{\partial T} \;\; {}_n \qquad \mu_{S,r}^{\infty} = \frac{P_r}{2c_V} \;\; \frac{\partial P_r}{\partial T} \;\; {}_n .$$

Выражения (9) с учётом (7) и (8) позволяют исследовать зависимости статических модулей упругости жидкостей от температуры, давления и плотности.

В первом разделе третьей главы формулируются уравнения обобщённой гидродинамики. Усредняя релаксационные источники в (5) по НФР, получим сложные аналитические выражения, связывающие $I^{\alpha\beta} \;\; {}_t$ с тензорами $\sigma^{\alpha\beta}$, где коэффициенты при $\sigma^{\alpha\beta}$ имеют размерность обратного времени. Однако эти коэффициенты очень сложные и имеют вид тензоров четвертого ранга, тогда как время является скалярной величиной. Для упрощения этих тензоров предполагали, $\langle P_r^{\alpha\beta} P_t^{\gamma\sigma}(t)\rangle_0 \ll \langle P_t^{\alpha\beta} P_t^{\gamma\sigma}(t)\rangle_0$ и $\alpha = \gamma,\ \beta = \sigma$, что означает пренебрежение корреляцией тензоров обусовленных разными степенями свободы молекул и вкладами релаксации, несовпадающих компонент тензоров $\sigma^{\alpha\beta}$ в временные изменения собственных компонент и компонент других тензоров. В рамках таких предположений входящих в $I^{\alpha\beta} \;\; {}_t$ характерные времена релаксации становятся скалярными величинами и систему уравнений (5) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \sigma_t^{\alpha\beta} \;\; x,\theta,t}{\partial t} + \frac{\sigma_t^{\alpha\beta} \;\; x,\theta,t}{\tau_{tt}} + \frac{\sigma_{tr}^{\alpha\beta}(x,\theta,t)}{\tau_{t\,tr}} + \frac{\sigma_r^{\alpha\beta}(x,\theta,t)}{\tau_{tr}} = A_t^{\alpha\beta} \;, \\
&\frac{\partial \sigma_{rt}^{\alpha\beta}(x,\theta)}{\partial t} + \frac{\sigma_{tr}^{\alpha\beta}(x,\theta,t)}{\tau_{tr\,tr}} + \frac{\sigma_r^{\alpha\beta} \;\; x,\theta,t}{\tau_{tr\,r}} + \frac{\sigma_t^{\alpha\beta} \;\; x,\theta,t}{\tau_{tr\,t}} = 0, \\
&\frac{\partial \sigma_r{}^{\alpha\beta}(x,\theta,t)}{\partial t} + \frac{\sigma_r^{\alpha\beta}(x,\theta,t)}{\tau_{rr}} + \frac{\sigma_{tr}^{\alpha\beta} \;\; x,\theta,t}{\tau_{r\,tr}} + \frac{\sigma_t^{\alpha\beta}(x,\theta,t)}{\tau_{rt}} = A_r^{\alpha\beta}.
\end{aligned} \tag{10}$$

Система уравнений (10) представляет замкнутую систему уравнений обобщённой (релаксационной) гидродинамики, позволяющей исследовать динамические вязкоупругие свойства многоатомных жидкостей. Здесь гидродинамические источники $\mathrm{A}^{\alpha\beta}$ определяются выражениями (6).

Во втором разделе третьей главы проведен детальный анализ молекулярных механизмов релаксационных процессов и показано, что не все входящие в (10) параметры τ имеют размерность времени. Установлено, что на основе исходных выражений, все эти параметры τ можно выразить через три основные характерные времена релаксации -τ_{tt}, τ_{rr} и τ_{tr} :

$$\tau_{tt} = \frac{5m}{3\beta_{tt}}, \qquad \beta_{tt} = \frac{1}{3kT} \;\; {}_0^t \; F \;\; t \;\; F \;\; 0 \;\; {}_o \, dt; \tag{11а}$$

$$\tau_{rr} = \frac{5I}{3\beta_{rr}}; \qquad \beta_{rr} = \frac{1}{3kT} \;\; {}_0^t \; N \;\; t \;\; N \;\; 0 \;\; {}_o \, dt; \tag{11б}$$

$$\tau_{tr} = \frac{\overline{mI}}{\beta_{tr}}, \qquad \beta_{tr} = \frac{1}{3kT} \;\; {}_0^t \; F \;\; 0 \;\; N \;\; t_1 \;\; {}_o \, dt_1; \tag{11в}$$

$$\tau_{tr\,tr} = \frac{4\tau_{tt}\tau_{rr}}{\tau_{tt}+\tau_{rr}}; \quad \tau_{t\,tr} = \tau_{r\,tr} = 4 \;\; \frac{\overline{m}}{I}\tau_{tr} \quad \tau_{tr\,t} = \tau_{tr\,r} = \frac{20}{3} \;\; \frac{\overline{I}}{m}\tau_{tr} \tag{11г}$$

$$(\tau_{tr})^{-1} = 0;\ (\tau_{rt})^{-1} = 0; \qquad (11д)$$

Подставляя (11) в (10), для Фурье – образов тензоров $\sigma^{\alpha\beta}$ получим систему уравнений релаксационной гидродинамики (10) в виде

$$\begin{aligned}
&(1+i\nu\tau_{tt})\sigma_t^{\alpha\beta}\ x,\theta,t\ + \frac{\tau_{tt}}{4\tau_{tr}}\ \frac{\overline{I}}{m}\sigma_{tr}^{\alpha\beta}\ x,\theta,t\ = \tau_{tt}A_t^{\alpha\beta}\ ,\\
&1 + i\nu\tau_{trtr}\ \sigma_{tr}^{\alpha\beta}\ x,\theta,\nu\ + \frac{3\tau_{tr\,tr}}{20\tau_{tr}}\ \frac{\overline{m}}{I}\ \sigma_t^{\alpha\beta}\ x,\theta,\nu\ + \sigma_r^{\alpha\beta}\ x,\theta,\nu\ = 0, \qquad (12)\\
&(1+i\nu\tau_{rr})\sigma_r^{\alpha\beta}\ x,\theta,t\ + \frac{\tau_{rr}}{4\tau_{tr}}\ \frac{\overline{I}}{m}\sigma_{tr}^{\alpha\beta}\ x,\theta,t\ = \tau_{rr}A_r^{\alpha\beta}.
\end{aligned}$$

Для жидких систем, где обмен энергией между одинаковыми степенями свободы молекул происходит гораздо быстрее, чем обмен энергией между различными степенями свободы, т.е. где выполняется условие $\frac{\tau_{tt}}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_{rr}}{\tau_{rt}}, \ll 1$, система уравнения (12) принимает вид

$$\sigma_t^{\alpha\beta}(x,\theta,\nu) = \frac{\tau_{tt}}{(1+i\nu\tau_{tt})}A_t^{\alpha\beta},\ \sigma_r^{\alpha\beta}(x,\theta,\nu) = \frac{\tau_{rr}}{(1+i\nu\tau_{rr})}A_r^{\alpha\beta},\ \sigma_{tr} = 0. \qquad (13)$$

Первое выражение (13), где определяющую роль играют трансляционные релаксационные процессы, с большой точностью могут описать динамические вязкоупругие свойства жидкостей, молекулы которых представляют собой гладкие упругие шары. К таким простым жидкостям можно отнести и одноатомные жидкости. С учётом этого, подставляя значение $A_t^{\alpha\beta}$ из (6) в (13), принимая во внимание соотношение Ньютона

$$\sigma^{\alpha\beta}(\nu) = -\eta(i\nu)\ \frac{\partial u^{\alpha}(x,\nu)}{\partial x^{\beta}}\ \text{ и } \eta_{tt}(i\nu) = \eta_{tt}(\nu) - \frac{i}{\nu}\mu_{tt}(\nu),$$

для динамических коэффициентов сдвиговых ($\eta_{s\ tt}\ \nu$) и объёмных ($\eta_{V\ tt}(\nu)$) вязкостей и соответствующих им динамических модулей упругости одноатомных жидкостей ($\mu_{s\ tt}(\nu)$ и $\mu_{V\ tt}(\nu)$) получим следующие выражения:

$$\eta_{s\ tt}(\nu) = \frac{\mu_{s,tt}^{\infty}\,\tau_{tt}}{1+(\nu\tau_{tt})^2},\ \ \mu_{s\ tt}(\nu) = \frac{\mu_{s,tt}^{\infty}(\nu\tau_{tt})^2}{1+(\nu\tau_{tt})^2} \qquad (14а)$$

$$\eta_{V\ tt}(\nu) = \frac{\mu_{V,tt}^{\infty}\tau_{tt}}{1+(\nu\tau_{tt})^2},\ \ \mu_{V\ tt}(\nu) = \frac{\mu_{V,tt}^{\infty}(\nu\tau_{tt})^2}{1+(\nu\tau_{tt})^2} \qquad (14б)$$

Выражения (14) позволяют исследовать динамические вязкоупругие свойства простых одноатомных жидкостей в широком диапазоне изменения термодинамических параметров состояния и частоты внешнего вомущения.

В последнем четвёртом разделе третьей главы полученные упрощённые выражения применяются для исследования динамических вязкоупругих параметров жидкого аргона. Для определения молекулярных параметров жидкого аргона исходим из таблицы 1. С учётом табл. 1 для коэффициента

Таблица 1

Значение некоторых молекулярных параметров жидкого аргона,

азота, кислорода, аммиака и воды

Вещество	Масса молекулы $m \cdot 10^{27}$, кг	Диаметр молекулы $\sigma \cdot 10^{10}$, м	Момент инерции молекул	Энергетический параметр ε/k,	Дипольный момент d·10^{30}, Кл·м	$B_{tt} 10^{-15}$, кг с	$B_{rr} * 10^{-34}$, кг · м^2 с	$B_{tr} 10^{-25}$, кг · м с
Аргон	66,34	3,405		119		1.8		
Азот	46,5	3,681	1,84	93,275		0,21	0,505	0,343
Кислород	53,2	3,433	1,9	115,25		0,31	0,624	0,469
Вода	29,9	2,65	0,32	380	6,1	2,6	1,8	6,8
Аммиак	28,24	2,6	0,36	320	4,9	3	2,1	7,9

внутреннего трения жидкого аргона получим

$$\beta_{tt} = 0{,}18 \cdot 10^{-14}\ \tau \frac{n}{T}\ {}_0^{\infty}\left(\frac{\partial \Phi\ r}{\partial r}\right)^2 g_0\ r\ r^2 dr,\ \ \frac{кг}{с}, \tag{15}$$

где $r = \frac{x_{ij}}{\sigma}$ - безразмерное взаимное расстояние молекул, $\Phi(r) = \frac{\Phi(x_{ij})}{\varepsilon}$ - безразмерный потенциал межмолекулярного взаимодействия, $\mathrm{T} = \frac{k_Б \mathrm{T}}{\varepsilon}$ – безразмерная температура, $n = n \cdot \frac{1}{6}\pi\sigma^3$- безразмерная плотность жидкости.

Теперь задача определения вязкоупругих параметров аргона сводится к задаче определения $\Phi(r)$ и $g(r)$, которые согласно [4] выбираем в виде

$$\Phi\ r\ = \begin{cases} \infty, & если\ \ r\ \le 1 \\ 4\ \frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^6}\ , & если\ 1 < r < \infty \end{cases} \tag{16}$$

$$g_o(r) = \begin{cases} \frac{2-\mathrm{n}}{2(1-n)^3}, & r \le 1 \\ e^{-\frac{\Phi\ r}{T}}\ y\ r\ , & 1 \le r \le 2 \\ e^{-\frac{\Phi\ r}{T}}, & r > 2\,. \end{cases} \tag{17}$$

Результаты численного расчёта зависимости коэффициента внутреннего трения β_{tt} и характерного времени трансляционной релаксации $\tau_{tt} = \frac{5m}{3\beta_{tt}}$ от температуры и плотности для жидкого аргона по выражениям (15)-(17) приведены в табл. 2.

Заметное увеличение β_{tt} с увеличением плотности и с уменьшением температуры характерно природе жидкостей. Возрастание τ_{tt} с ростом температуры говорит о термической природе трансляционных релаксаций. Более слабые температурные зависимости β_{tt} и τ_{tt} при фиксированных значениях плотности и более существенные их зависимости от температуры при экспериментально согласованных значениях плотности и температуры (диагональные значения) указывают на определяющую роль межмолекулярных

Таблица 2

Значения коэффициента внутреннего трения жидкого аргона (β_{tt}) и характерного времени трансляционной релаксации τ_{tt} при разных

температурах и плотностях

Темпер. Т,К	Плотность ρ, кг м^3							
	1402	1377	1312	1240	1160	1065	1031	968
	Значения β_{tt} Т, ρ , 10^{-13} кг с							
86	4,8726	4,7218	4,3538	3,9813	3,6038	3,1966	3,0601	2,8185
90	4,8318	4,6753	4,2951	3,9127	3,5278	3,1158	2,9785	2,7363
100	4,7733	4,6045	4,1974	3,7927	3,3907	2,9666	2,8268	2,5823
110	4,7572	4,5778	4,1474	3,7232	3,3055	2,8696	2,7271	2,4792
120	4,7674	4,5788	4,1278	3,6858	3,2537	2,8063	2,6609	2,4091
130	4,7941	4,5972	4,1276	3,6695	3,2239	2,7654	2,6170	2,3611
135	4,8115	4,6108	4,1326	3,6669	3,2149	2,7510	2,6012	2,3432
140	4,8308	4,6264	4,1400	3,6670	3,2088	2,7397	2,5885	2,3284
	Значения τ_{tt} Т, ρ , 10^{-13}с							
86	3,4040	3,5127	3,8097	4,1661	4,6025	5,1888	5,4202	5,8847
90	3,4328	3,5476	3,8617	4,2391	4,7016	5,3233	5,5688	6,0616
100	3,4748	3,6022	3,9516	4,3732	4,8917	5,5910	5,8675	6,4232
110	3,4866	3,6232	3,9992	4,4549	5,0178	5,7800	6,0821	6,6903
120	3,4791	3,6225	4,0182	4,5001	5,0978	5,9105	6,2335	6,8850
130	3,4598	3,6080	4,0184	4,5201	5,1449	5,9979	6,3378	7,0247
135	3,4472	3,5973	4,0136	4,5233	5,1593	6,0293	63764	7,0785
140	3,4335	3,5852	4,0064	4,5231	5,1690	6,0541	6,4078	7,1236

взаимодействий в определении характера релаксационных процессов в жидкостях. Это соответствует выводам известного в литературе механизма Бачинского (или теории Адхамова А.А.).

Чтобы показать обоснованность данного предположения, при проведении численных расчётов в (15) от переменных (n, Т) переходили к переменным (Р,Т). Результаты численных расчётов изобарных значений β_{tt} Т и τ_{tt} Т (рис.1) по всему диапазону изменения температуры проявляют характерное для жидкостей уменьшение значений β_{tt} Т с ростом температуры. При этом более существенная температурная зависимость τ_{tt} наблюдается при высоких значениях давления. Следовательно, наши теоретические результаты правильно отражают вклады взаимодействия молекул и лучше описывают динамические вязкоупругие свойства жидкостей при высоких давлениях.

С учётом табл. 1 уравнения состояния (7) и (8) для жидкого аргона принимают вид

$$P_t\ x,t\ = 8\cdot 10^7\cdot nT\ \ 1-\frac{4n}{T}\ \ {}_0^{\infty}\frac{\partial\Phi\ r}{\partial r}g_o\ r\ r^3dr\ \text{, Па} \qquad (18а)$$

$$e\ x,t\ = 6\cdot 10^7\cdot nT\ \ 1+\frac{16n}{3T}\ \ {}_0^{\infty}\Phi\ r\ g_o\ r\ r^2dr\ \ ,\ \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3}, \qquad (18б)$$

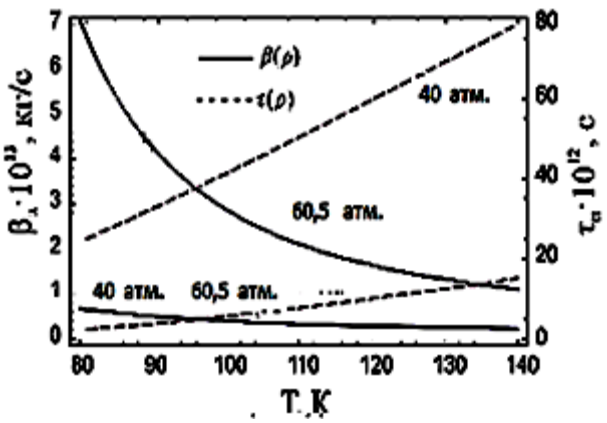

Рис. 1. Температурные зависимости коэффициента внутреннего трения β_{tt} и времени трансляционной релаксации τ_{tt} для жидкого аргона при давлениях 40 и 60,5 атм.

Теперь, используя выражения (9),(18) и значения τ_{tt} n, T , по выражениям (14) можем провести численные расчёты зависимостей динамических коэффициентов сдвиговых $\eta_{s\,tt}$ ν и объёмных η_{Vtt} ν) вязкостей, а также соответствующих им динамических модулей сдвиговой $\mu_{s\,tt}$ ν и объёмной μ_{Vtt} ν упругости жидкого аргона от температуры и плотности. Результаты расчёта зависимости низкочастотных значений динамического коэффициента сдвиговой вязкости жидкого аргона приведены в табл. 3.

Таблица 3

Зависимость низкочастотных значений сдвиговой вязкости аргона от температуры и плотности

ρ, кг м^3 / T, K	1402	1377	1312	1240	1160	1065	1031	968	Эксп. [23]
86	0,2725	0,2576	0,2215	0,1857	0,1508	0,1154	0,1042	0,0853	0,272
90	0,2605	0,2467	0,2131	0,1797	0,1468	0,1132	0,1025	0,0844	0,235
100	0,2347	0,2231	0,1948	0,1661	0,1375	0,1079	0,0983	0,0821	0,18
110	0,2136	0,2038	0,1794	0,1545	0,1294	0,1030	0,0944	0,0797	0,144
120	0,1962	0,1877	0,1664	0,1445	0,1222	0,0985	0,0908	0,0774	0,113
130	0,1816	0,1741	0,1554	0,1359	0,1159	0,0945	0,0874	0,0752	0,086
135	0,1752	0,1681	0,1504	0,1320	0,1130	0,0926	0,0859	0,0742	0,075
140	0,1692	0,1626	0,1459	0,1284	0,1103	0,0908	0,0844	0,0731	0,065

На последнем столбце табл. 3 приведены экспериментальные результаты. Можно заметить, что как в случае коэффициента внутреннего трения с увеличением температуры значения сдвигового коэффициента вязкости уменьшаются, что характерно жидкому состоянию. Более резкое уменьшение $\eta_{s\,tt}$ T при экспериментально согласованных значениях плотности и температуры (диагональные значения табл. 3) подтверждают определяющую роль межмолекулярного взаимодействия в определении характера температурной зависимости динамических вязкоупругих пара-метров жидкостей. Более близкие к экспериментальным данным значении $\eta_{s\,tt}$ T наблюдается при согласованных значениях n и T (диагональные эле-

менты табл. 3).

На рис. 2 представлены результаты численного расчёта $\eta_{s\,tt}$ T по (14а) и по результатам [2], где производные давления по времени $A_t^{\alpha\beta}$ входили как известный параметр (точки). Как видно из рис. 2, корректный учёт изменения давления по времени в гидродинамических источниках (6)

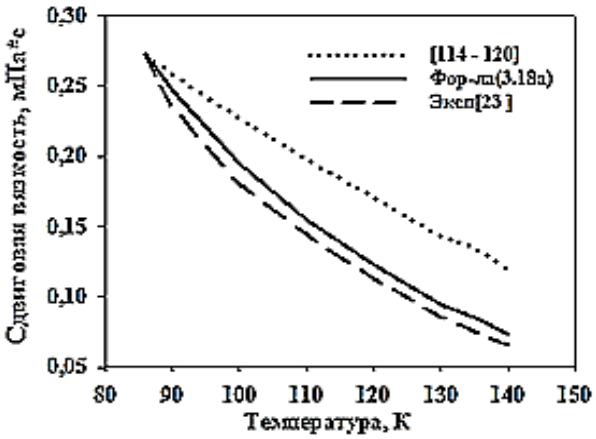

Рис. 2. Температурные зависимости коэффициента сдвиговой вязкости жидкого аргона при экспериментально согласованных значениях плотности и температуры.

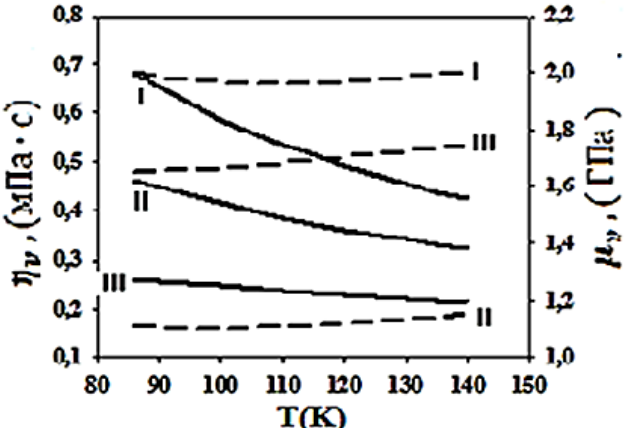

Рис. 3. Температурные зависимости объёмной вязкости (сплошные) и модуля объёмной упругости (пунктиры) жидкого аргона при плотностях: I - 1402 кг/м^3, II - 1240 кг/м^3, III – 1031, кг/м^3.

значительно улучшает соответствие теоретических результатов (сплошная) с экспериментальными результатами (пунктирная).

На рис. 3 приведены результаты численных расчётов температурных зависимостей низкочастотных значений динамического коэффициента объёмной вязкости и высокочастотных значений динамического модуля объёмной упругости жидкого аргона при трёх плотностях. Из рисунка видна существенная разница в температурных зависимостях $\eta_{V\,tt}$ T и $\mu_{V\,tt}$ T , что говорит о превалирующей роли времени релаксации τ_{tt} T в температурной зависимости $\eta_{V\,tt}$ T . Тенденция к увеличению $\mu_{V\,tt}$ T с ростом температуры при фиксированных значениях плотности говорит, как было отмечено, об определяющей роли взаимодействия молекул в формировании вязкоупругих свойств жидкостей.

На рис. 4 приведены результаты численного расчёта частотной зависимости динамического коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_{s\,tt}$ ν и соответствующего ему динамического модуля сдвиговой упругости $\mu_{s\,tt}$ ν при трёх

значениях температуры по вы-ражениям (14). С большой точностью можно сказать, что закономерность $\eta_{V\,tt}\ \nu$ и $\mu_{V\,tt}\ \nu$ будут такими же, как на рис. 4. Согласно рис. 4 в областях низких частот вязко-упругие свойства жидкостей определяются низкочастотны-ми значениями коэффициентов вязкостей, а в высокочастотных высокочастотными значениями модулей упругости жидкости.

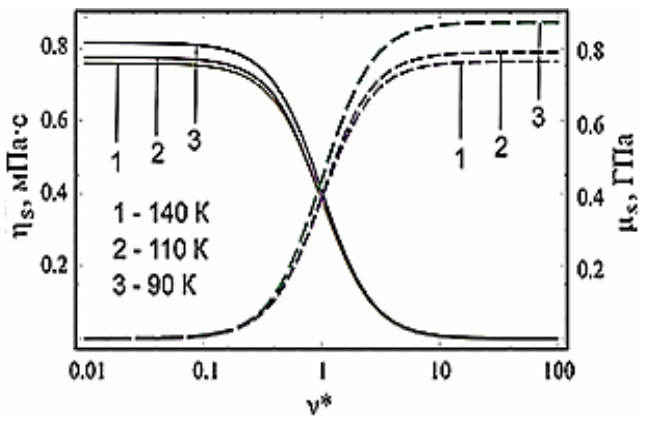

Рис. 4. Частотные зависимости динамических коэффициентов сдвиговой вязкости (сплошные) и модуля сдвиговой упругости (пунктиры) жидкого аргона при трех значениях температуры.

В четвёртой главе на основе системы уравнений обобщённой гидродинамики (12) исследованы динамические вязкоупругие свойства многоатомных жидкостей. Предполагая, что в многоатомных жидкостях перекрёстный обмен энергией между поступательными и вращательными степенями свободы происходит быстрее, чем обмен энергией между одинаковыми степенями свободы молекул, и где выполняется условие $\frac{\tau_{\mathrm{tt}}}{\tau_{\mathrm{tr}}}, \frac{\tau_{\mathrm{rr}}}{\tau_{\mathrm{tr}}} \gg 1$, для тензора вязкого напряжения, обусловленного взаимодействиями вращательных и поступательных степеней свободы молекул, получено выражение

$$\sigma_{tr}^{\alpha\beta}\ \ x,\theta\nu\ \ = \frac{A_{tr}^{\alpha\beta}\, a\tau_{tr}}{2\ 1+i\nu\tau_{\text{эф}}\ \ 1+\ \nu\tau_{tr}\ ^{2}}, \tag{19}$$

где

$$\tau_{\text{эф}} = \frac{10\tau_{tr}{}^{2}\ \ \tau_{tt}+\tau_{rr}}{3\ \tau_{tt}\tau_{rr}}$$

есть эффективное время релаксации, $a = 4\ \ \frac{\overline{m}}{L}, A_{tr}^{\alpha\beta} = A_{t}^{\alpha\beta} + A_{r}^{\alpha\beta}$,

$$\mu_{s,tr}^{\infty} = P_t\ \ 1-\frac{1}{c_V}\ \ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _{n}\ \ 1-\frac{P_r}{P_t}\ \ ; \qquad \mu_{s,tr}^{\text{в}\infty} = \frac{P_t}{2c_V}\ \ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _{n} + \frac{\partial P_r}{\partial T}\ _{n}\ ; \tag{20}$$

$$\mu_{V,tr}^{\infty} = P_t\ \ \frac{5}{2}+\frac{P_r}{P_t}-\frac{n}{P_t}\ \ \frac{\partial P_t}{\partial n}\ _{T} + \frac{\partial P_r}{\partial n}\ _{T}\ -\frac{e+P_t}{P_t c_V}\ \ \frac{\partial P_t}{\partial T}\ _{n} + \frac{\partial P_r}{\partial T}\ _{n}\ ;\ \ \mu_{V,tr}^{\text{в}\infty} = \mu_{V,tr}^{\infty} - \frac{3}{2}\mathrm{P}\ .$$

Вставляя (20) в (19), определяя затем реальные и мнимые части коэффициентов при градиентах скоростей, для динамичеких коэффициентов вязкостей многоатомных жидкостей $(\eta(\nu))$ и соответствующих им динамических модулей упругости $(\mu(\nu))$ находим выражения

$$\eta_{s\,tr}(\nu) = \frac{\mu_{s\,tr} a\tau_{tr}}{2(1+\ \nu\tau_{\text{эф}}\ ^{2})(1+\ \nu\tau_{tr}\ ^{2})}\ ;\ \eta_{V\,tr}(\nu) = \frac{\mu_{V\,tr} a\tau_{tr}}{2(1+\ \nu\tau_{\text{эф}}\ ^{2})(1+\ \nu\tau_{tr}\ ^{2})}\ ; \tag{21}$$

$$\mu_{s\,tr}(\nu) = \frac{\mu_{s\,tr} a \nu^2 \tau_{tr} \tau_{эф}}{2(1+\ \nu\tau_{эф}\ ^2)(1+\ \nu\tau_{tr}\ ^2)}\,;\ \mu_{V\,tr}(\nu) = \frac{\mu_{V\,tr} a \nu^2 \tau_{tr} \tau_{эф}}{2(1+\ \nu\tau_{эф}\ ^2)(1+\ \nu\tau_{tr}\ ^2)}\,;$$

Из (21) видно, что динамические вязкоупругие параметры многоатомных жидкостей имеют две релаксационные области - первая с $\nu\tau_{эф}\sim 1$ и вторая с $\nu\tau_{tr}\sim 1$.

Во втором разделе главы выражения (21) применяются для исследования зависимости динамических вязкоупругих параметров неполярных жидких кислорода и азота от температуры, плотности и частоты. С учётом табл.1, для коэффициентов внутреннего трения получим

$$\beta_{tt} = \mathrm{B}_{tt}\tau\ \frac{n}{T}\ \int_0^\infty \left(\frac{\partial\Phi\ r.\theta}{\partial r}\right)^2 g_0\ r.\theta\ r^2 dr \sin\ \theta\ \ d\theta,\ \frac{кг}{с};$$

$$\beta_{rr} = \mathrm{B}_{rr}\tau\frac{n}{T}\ \int_0^\infty \left(a\ \frac{\partial\Phi(r,\theta)}{\partial\theta}\right)^2 g_0\ r.\theta\ r^2 dr \sin\ \theta\ \ d\theta\ ,\frac{кг\cdot м^2}{с}\ ; \qquad (22)$$

$$\beta_{tr} = \ \mathrm{B}_{tr}\tau\ \frac{n}{T}\ \int_0^\infty \left(\frac{\partial\Phi\ r.\theta}{\partial r}\right)\left(a\ \frac{\partial\Phi\ r.\theta}{\partial\theta}\right)\ g_0\ r,\theta\ r^2 dr \sin\ \theta\ \ d\theta,\frac{кг\cdot м}{с}.$$

Соответствующие времена релаксации равны

$$\tau_{tt} = \frac{5m}{3\beta_{tt}};\ \tau_{rr} = \frac{5I}{3\beta_{rr}};\ \tau_{tr} = \frac{\overline{mI}}{\beta_{tr}}.$$

В качестве зависящего от углов потенциала парного взаимодействия молекул выбираем потенциал Адхамова – Часовских

$$\Phi(r,\theta) = \begin{cases} \infty, & если\quad r \le 1; \\ 4\varepsilon\ \theta_{kl}\ \left(\frac{\sigma\ \theta_{kl},\theta_{kr},\theta_{lr},}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma\ \theta_{kl},\theta_{kr},\theta_{lr},}{r}\right)^{6} & ,если\ 1 < r < \infty. \end{cases} \qquad (23)$$

На рис.5 приведены результаты численного расчёта температурной зависимости коэффициентов внутреннего трения и характер ных времён релаксации для жидкого кислорода. Заметно, что все характерные для одноатомных жидкостей закономерности качественно проявляются и для многоатомных жидкостей, но количественно отличаются.

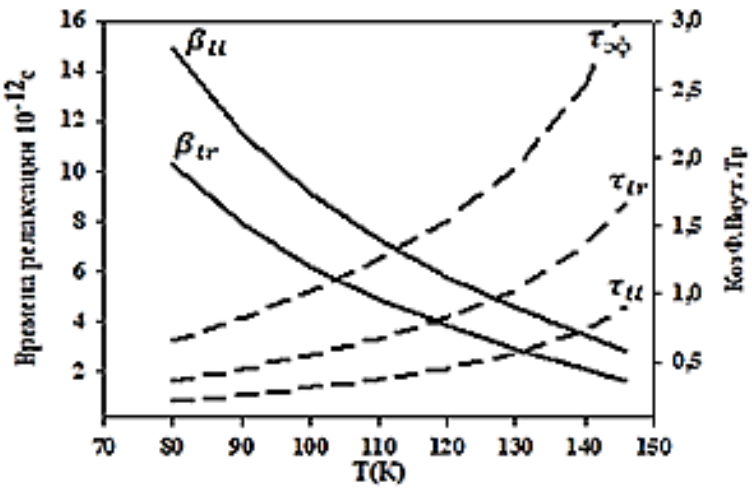

Рис. 5. Температурные зависимости характерных времён релаксации ($\tau_{эф}\,,\tau_{tr},\tau_{tt}$) и коэф. внутреннего трения (β_{tt},β_{tr}) для жидкого кислорода.

Такие общности свойств одноатомных и многоатомных жидкостей можно заметить и в закономерностях температурной зависимости динамических коэффициентов вязкости и динамических модулей упругости этих жидкостей, которые приведены на рис. 6 и 7. Из рис. 6 четко видно, как в

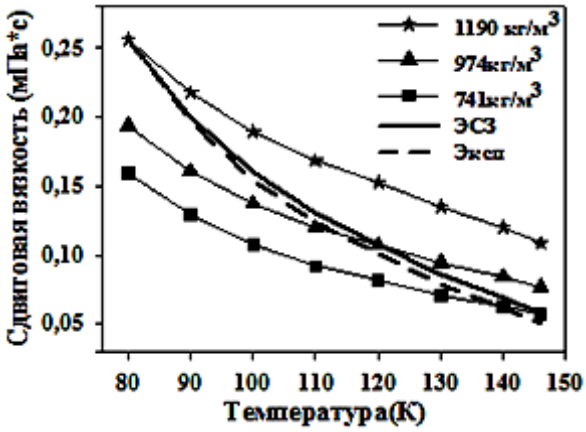

Рис. 6. Зависимость сдвиговой вязкости жидкого кислорода от температуры при экспериментально согласованных значениях температуры и плотности (кривая ЭСЗ), и трёх значениях плотности.

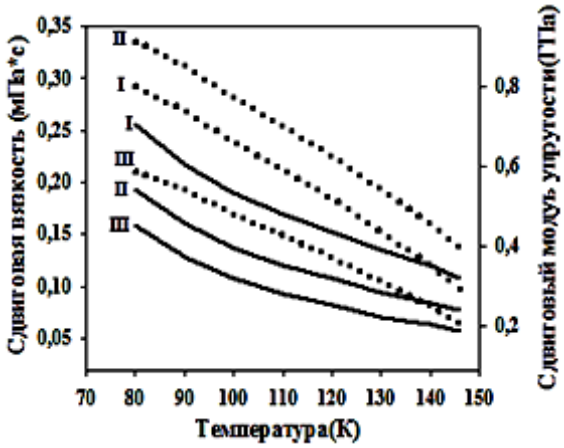

Рис.7. Зависимость сдвиговой вязкости (сплошные) и сдвигового модуля упругости (пунктиры) жидкого кислорода от температуры при трех значениях плотности: I-1190 кг/м^3; II-974 кг/м^3; III-741 кг/м^3.

случае жидкого аргона сдвиговая вязкость кислорода проявляет слабую температурную зависимость при фиксированных значениях плотности (■,▲,⋆), а при экспериментально согласованных значениях плотности и температуры (сплошные) дает близкие к эксперименту (пунктиры) результаты. Следует обратить внимание на результаты численного расчёта зависимости низкочастотных значений динамического коэффициента сдвиговой вязкости (сплошные) и высокочастотного значения сдви-гового модуля упругости (точеч-ные) от температуры для кислоро-да при трёх значениях плотности. Хотя и здесь, как в предыдущих случаях, при фиксированных значениях плотности зависимости вязкоупругих параметров жидкос-ти от температуры слабые, харак-тер зависимостей η_{Stt} (T) и μ_{Stt} T отличается.

Кривые μ_{Stt} T выпуклые (точечные кривые), а кривые η_{Stt} T вогнутые (сплошные кривые) и они соответствуют существующим в литературе информациям. Следовательно, взаимосвязь этих разных зависимостей можно объяснить только более сильной зависимостью времени релаксации от температуры. Близкие к экспериментальным данным результатов теоретических расчётов при возможности изменения плотности жидкостей и синхронизации температурных зависимостей вязкости и модуля упругости жидкостей свой-

ством времени релаксации, даёт основание говорит об определяющей роли взаимодействия молекул и внутренних релаксационных процессов в формировании динамических вязкоупругих свойств одноатомных и многоатомных жидкостей. Заметим, что для неполярных многоатомных жидкостей было предположено $\tau_{tt} \ll \tau_{rr}$.

В третьем последнем параграфе главы на основе выражения (21) с учётом условие $\tau_{rr} \ll \tau_{tt}$ и потенциала межмолекулярного взаимодействия Штокмайера $\Phi\ r,\theta\ = 4\ \ r^{-12} - r^{-6} - \mu f(\theta_i,\theta_j,\Delta\varphi) r^{-3}$ исследованы динамические вязкоупругие свойства полярных жидкостей (воды и жидкого аммиака). Молекулярные параметры воды и жидкого аммиака были взяты из табл.1.

На рис. 8 представлены температурные зависимости коэффициента внутреннего трения и времени релаксации воды для разных плотностей. Чётко видны линейное снижение коэффициентов внутреннего трения (пунктиры) и линейный рост соответствующих времён релаксации (сплошные) с ростом температуры. Такой характер изменения β T и τ T вполне соответствует установленным поведениям этих параметров в жидкостях. При повышении температуры жидкости как бы становятся более рыхлыми, внутренняя энергия трения в них уменьшается, а в рыхлых системах (газах) значения характерных времён термических релаксационных процессов самые большие.

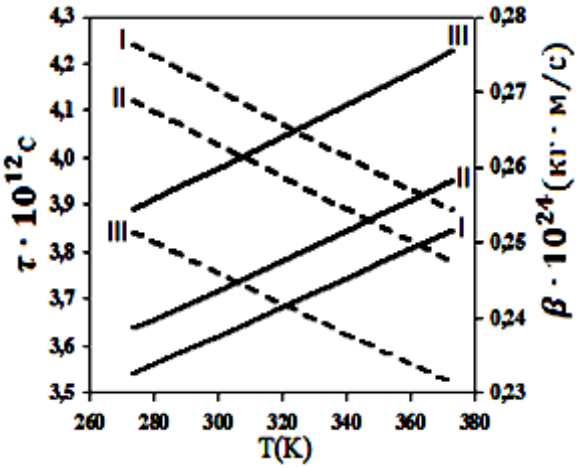

Рис. 8. Температурные зависимости коэффициента внутреннего трения и времени релаксации воды для плотностей: I - 999,83 кг/м^3; II - 987,96 кг/м^3; III- 958,22 кг/м^3.

На рис. 9 представлены результаты численного расчёта температурной зависимости динамического коэффициента сдвиговой вязкости (*а*) и динамического сдвигового модуля упругости (*б*) для воды при трёх фиксированных значениях плотности (сплошные) и при экспериментально согласованных значениях температуры и плотности(пунктирные). Из этого рисунка видно, что характер изменения динамического коэффициента сдвиговой вязкости аналогичен изменению этого параметра для неполярных жидкостей (см. рис. 6). Такие аналогии наблюдаются и по температурной за-

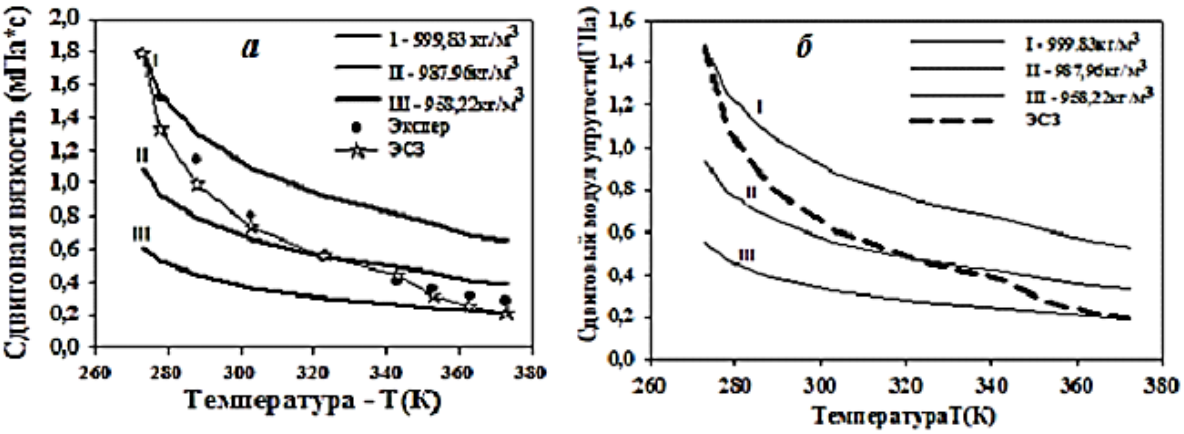

Рис. 9. Температурные зависимости динамического коэффициента сдвиговой вязкости (а) и динамического модуля упругости (б) воды для плотностей: I-999.83 кг/м^3; II-987.96кг/м^3; III-958.22кг/м^3.

висимости других динамических вязкоупругих параметров. Исходя из таких аналогий, можно говорить о качественной идентичности плотностных и температурных зависимостей, соответствующих динамическим вязкоупругим параметрам простых одноатомных и сложных многоатомных жидкостей.

На рис. 10 приведены результаты численных расчётов частотной зависимости динамического коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_{Stt}\ \nu$ и ответствующего им динамического модуля сдвиговой упругости $\mu_{Stt}\ \nu$ воды от частоты при трёх значениях плотности и температуры. Сразу можно

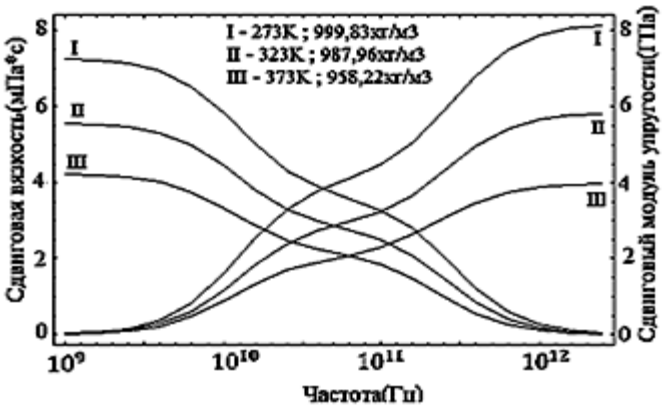

Рис. 10. Численный расчёт частотных зависимостей динамического коэффициента сдвиговой вязкости и динамического модуля сдвиговой упругости воды при трёх значениях температуры и плотности.

заметить две характерные релаксационные области, разнесённые друг от друга примерно на 100 Гц. Это вполне соответствует интервалу смещения трансляционных и вращательных релаксационных процессов. Почти аналогичным выглядят графики частотной зависимости динамических вязкоупругих коэффициентов неполярных жидкостей. Здесь, на рис. 10, конечно, значение и размерность левых и правых осей координат не сопоставимы, но качественно можно утвердить, что в определении вязкоупругих свойств жидкостей в областях низких частот преобладают вязкие, а в областях высоких частот упругие свойства жидкостей.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Проведена корректировка и обобщение результатов молекулярно-статистической теории асимметричных жидкостей с жёсткими молекулами произвольной формы для описания динамических вязкоупругих свойств многоатомных жидкостей.

2. Сформулирована замкнутая система уравнений обобщённой гидродинамики, для компонент тензоров вязких напряжений, позволяющая описать динамические вязкоупругие свойства многоатомных жидкостей с учётом особенностей их структуры и вкладов, происходящих в них внутренних термических релаксационных процессов.

3. Проведен детальный анализ молекулярных механизмов происходящих в многоатомных жидкостях внутренних релаксационных процессов и иерархия характерных времен релаксации; показано, что в рассматриваемых моделях многоатомных жидкостей все имеющиеся в них релаксационные процессы можно свести к трем основным релаксационным процессам; трансляционным(τ_{tt}), вращательным (τ_{rr}) и интерференционным, т.е. обменным между трансляционными и вращательными степенями свободы τ_{tr}. Установлена, связь характерных времён релаксации с молекулярными механизмами диссипации энергии.

4. Получены упрощённые выражения для динамических вязкоупругих параметров жидкостей, в которых обмен энергией между одинаковыми степенями свободы молекул происходит гораздо быстрее, чем обмен энергией между различными степенями свободы (т.е. где $\tau_{tt}, \tau_{rr} \ll \tau_{tr}$) Показано, что полученные упрощённые выражения, в которых определяющую роль играют трансляционные релаксационные процессы, удовлетворительно описывают динамические вязкоупругие свойства простых одноатомных жидкостей.

5. Полученные упрощённые аналитические выражения для динамических вязкоупругих параметров жидких систем, где обмен энергией между различными степенями свободы происходит быстрее, чем обмен энергией между одинаковыми степенями свободы (т.е. где $\tau_{tt}, \tau_{rr} \gg \tau_{tr}$), применены для описания динамических вязкоупругих свойств неполярных и полярных многоатомных жидкостей. Показано, что в динамические вязкоупругие свойства многоатомных жидкостей вносят вклад все три имеющиеся в жидкости релаксационные процессы (трансляционные (τ_{tt}), ные(τ_{rr}) и перекрестные (τ_{tr})) и в в многоатомных жидкостях имеют место как минимум две релаксационные области с характерными временами релаксации τ_{tr} и $\tau_{эф} = \frac{10\tau_{tr}{}^2(\tau_{tt}+\tau_{rr})}{3\,\tau_{tt}\tau_{rr}}$.

6. Исследованы асимпотические поведения динамических вязкоупругих параметров многоатомных жидкостей при предельно высокочастотных и предельно низкочастотных динамических процессах. Показано, что при предельно низких частотах (где $\nu\tau \to 0$) динамические вязкоупругие свойства жидкостей описываются низкочастотными значениями коэффициентов вязкостей, а при высокочастотных процессах ($\nu\tau \to \infty$) высокочастотными значениями модулей упругости жидкости. В релаксационной области (при $\nu\tau \approx 1$) динамические вязкоупругие свойства жидкостей описываются как значениями динамических коэффициентов вязкостей, так и значениями соответствующих им динамических модулей упругости.

9. Выбором потенциалов межмолекулярных взаимодействий и алгоритмы численных расчётов на ЭВМ проведены численные расчёты зависимостей динамических вязкоупругих параметров одноатомных и многоатомных жидкостей (аргона, азота, кислорода, жидкого аммиака и воды) от температуры, плотности и частоты.

Публикации по теме диссертации

1. Абдурасулов А.А., Рахими А., **Шоайдаров Н.Б.** К статистической теории явлений переноса и релаксации в асимметричных жидкостях при динамических процессах //Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук, 2006.-№5(31).-С.103-108.

2. Абдурасулов А.А., Рахими А., **Шоайдаров Н.Б.** О динамических вязкоупругих свойствах некоторых простых моделей асимметричных жидкостей. // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук, 2016.-№1/3(200).-С.119-124.

3. **Шоайдаров Н.Б**., Абдурасулов Д.А., Абдурасулов А.А. О вкладе динамики изменения внутренних давлений в вязкоупругие свойства ассиметричных жидкостей. // Политехнический вестник. Серия Интеллект. Инновации. Инвестиции, 2020.-№4(52).-С.20-26.

4. **Шоайдаров Н.Б.** Исследование зависимости динамических вязкоупругих свойств воды от изменения плотности, температуры и частоты // Политехнический вестник. Серия Интеллект. Инновации. Инвестиции, 2021.-№3(55).-С.22-25.

5. Odinaev S.O., **Shoaydarov N.B.** Dependence of dynamic coefficient of shear viscosity of the ionic liquids on state parameters // Abstracts 6th international conference «Physics of liquids matter: modern problems» (PLMMP), 21-27, May, - 2014. - Kyiv, Ukraine, - P.91.

6. Абдурасулов А.А, Рахими А.Р., **Шоайдаров Н.Б.** О вращательной вязкости нематических жидких кристаллов // Материалы VIII Международной научно- практической конференции. «Перспективы развития науки и образования», посвящённой 25-летию Независимости РТ и 60-летию ТТУ им. академика М.С.Осими, 3-4 ноября, 2016.-С.116-120.
7. Абдурасулов А.А., Одинаев С.О. **Шоайдаров Н.Б.** Исследование изохорной вязкости простых моделей ассиметричных жидкостей. //Материалы VI Международной конференции. Современные проблемы физики, посвящённой 110-летию академика АН РТ С.У.Умарова и 90-летию академика АН Республики Таджикистан А.А.Адхамова, г. Душанбе, ФТИ им С.У.Умарова, 20-27 апреля, 2018.-С.92-94.
8. Абдурасулов А.А., Рахими А.Р., **Шоайдаров Н.Б.** К статистической теории вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей. // Материалы III Международной научно-практической конференции «Перспективы развития науки и образования в XXI веке», г. Душанбе, 22-24 мая, 2008.-С.265-268.
9. Абдурасулов А.А., Рахими А.Р., **Шоайдаров Н.Б.** Об одном подходе в молекулярной теории динамических вязкоупругих свойств простых жидкостей. //Материалы VIII научно-практической конференции «Перспективы развития науки и образования», ТТУ имени академика М.С.Осими, 3-4 ноября, 2016.-С.113-116.
10. Абдурасулов А.А., Рахими А.Р, **Шоайдаров Н.** Исследование вязкоупругие свойства жидкого аргона в зависимости от изменения плотности, температуры и частоты. // Материалы Республиканской научно-практической конференции «Проблемы металлургии Таджикистана и пути их решения», Филиал НИТУ (МИС и С) в г. Душанбе, 29-30 апреля, 2016.-С.63-66.
11. Абдурасулов Д.А., Абдурасулов А.А., **Шоайдаров Н.Б.** К молекулярной теории теплоёмкости изотропной фазы нематических жидких кристаллов // Материалы международной научно - практической конференции. «Электроэнергетика Таджикистана. Проблемы энергосбережения, энергоэффективности и использования возобновляемых источников энергии», секция-6. Естественные и гуманитарные науки, 2021.-С.312-317.
12. Абдурасулов Д.А., Абдурасулов А.А., **Шоайдаров Н.Б.** Исследование зависимости коэффициентов ориентационной деформации нематических жидких кристаллов от температуры и давления // Материалы международной научно практической конференции. «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития», Часть-1. Естественные и гуманитарные науки, 2021.-С.127-130.
13. **Шоайдаров Н.Б.** О вкладе перекрёстных релаксационных процессов в динамические вязкоупругие свойства полярных жидкостей//Материалы меж-

дународной научно практической конференции. «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития», Часть-1. Естественные и гуманитарные науки. - 2021. - С.180-186.

Цитированная литература

1. Фишер И.З. Статистическая теория жидкостей. М.: Физматгиз,1961. -280 с.
2. Крокстон К. Физика жидкого состояния. М.: «Мир», 1978. -400 с.
3. Френкель Я.И. Собрание избранных трудов. Кинетическая теория жидкостей. М.: Издательство АН СССР. Т.III, 1959. - 458 с.
4. Одинаев С.О, Адхамов А.А. Молекулярная теория структурной релаксации и явлений переноса в жидкостях. Душанбе: Дониш, 1998. -230 с.
5. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1972. -280 с.
6. Абдурасулов А.А. О неравновесной статистической функции распределения асимметричных жидкостей. //Доклады АН Республики Таджикистан, 1998. -Т.51. -№3-4. -С.36-41.