

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ ТАДЖИКИСТАН
ТАДЖИКСКИЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени академика М.С. Осими

На правах рукописи

УДК:532.1+532.7+532.13+532.72+538.9 +538.93

Абдурасулов Анвар Абдурасулович

**СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ЯВЛЕНИЙ И
ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В ЖИДКОСТЯХ С
ПРОИЗВОЛЬНЫМИ ФОРМАМИ МОЛЕКУЛ**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени доктора физико-математических
наук по специальности: 01.04.02 – Теоретическая физика

Душанбе – 2025

Работа выполнена на кафедре физики Таджикского технического университета имени академика М.С. Осими

Научный консультант:

ОДИНАЕВ САИДМУХАМАД,

- академик НАН Таджикистана, доктор физико-математических наук, профессор, заслуженный деятель науки и техники Таджикистана, лауреат Международной премии «Звезды Содружества»

Официальные оппоненты:

Маломуж Николай Петрович - доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики и астрономии Одесского национального университета имени И.И. Мечникова (г. Одесса, Украина).

Салихов Тагаймурод Хаитович - член-корреспондент НАН Таджикистана, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник НИИ Таджикского национального университета.

Кобиров Маруф Махмудович - доктор физико-математических наук, заведующий отделом прикладной математики и механики института математики имени А. Джураева НАН Таджикистана

Ведущая организация:

Институт физико-технических наук Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилёва (г. Астана, Казахстан).

Защита состоится 14 октября 2025 года в 14⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета 6D.KOA-056 при Таджикском национальном университете по адресу: 734027, Республика Таджикистан, г. Душанбе. п. Бунӣ Хисорак, учебный корпус № 16, Физический факультет, зал диссертационного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в Центральной научной библиотеке Таджикского национального университета по адресу 734025, г. Душанбе, проспект Рудаки 17, а также на сайте www.tnu.tj.

Автореферат разослан “ ____ ” _____ 2025 года

Учёный секретарь диссертационного совета 6D.KOA-056, к.ф.-м.н., доцент



Исломов З.З.

Введение

Актуальность темы исследования. В природе жидкое состояние вещества самая распространенная и широко используемая среда. Это среда, в которой, или в присутствии которой, происходят различные физические, химические, биологические и другие процессы. Исследование физических свойств жидкостей, поэтому, актуально не только в научно-практическом аспекте изучения самих жидкостей, но и в плане выяснения природы и механизмов многих явлений, происходящих и в этих смежных областях.

С открытием и широким использованием жидкокристаллических веществ, понятие жидкого состояния и область его применения значительно расширились. В перспективе возможны появления новых представлений о структуре и форме нахождения вещества в жидком состоянии. Вероятно, поэтому, проблемы исследования жидкостей продолжают оставаться как одной из актуальных задач современной физики от состояния изученности которой зависят решения многих вопросов молекулярной физики, теплофизики, акустики, биофизики и других областей науки.

При эксплуатации и в естественных условиях нахождения, жидкости подвергаются различного рода внешним возмущениям, и в большинстве случаев находятся в динамическом неравновесном состоянии. Известно, что теплофизические свойства жидкостей при динамических условиях существенно отличаются от их таких же свойств, при медленных и статических процессах. Влияние внешних возмущений на разные жидкости не одинаково, а зависит от их молекулярной структуры и от механизмов, происходящих в них внутренних релаксационных процессов. Например, установлено, что переносные свойства жидкостей, при низкочастотных динамических процессах, когда $\nu\tau \ll 1$ (τ - характерное время внутренних релаксационных процессов, ν - частота внешнего возмущения) характеризуются низкочастотными (статическими) значениями коэффициентов переноса, а при высокочастотных процессах, когда $\nu\tau \gg 1$, высокочастотными значениями соответствующих модулей упругости. В областях релаксации, где $\nu\tau \sim 1$, переносные свойства жидкостей определяются, как динамическими значениями коэффициентов переноса, так и динамическими значениями соответствующих им модулей упругости.

Исследования неравновесных теплофизических, в том числе переносных свойств жидкостей, с учётом особенностей молекулярной структуры жидкостей и механизмов, происходящих в них внутренних релаксационных процессов при динамических процессах, поэтому, является актуальной задачей физики жидкого состояния.

Если описать теплофизические свойства жидкостей вообще, явления переноса в том числе, исходя из уравнения обычной гидродинамики, которые формируются на основе законов сохранения с использованием известных выражений Фика, Ньютона и Фурье для потоков переноса, значения коэффициентов переноса остаются не определёнными и механизмы происходящих в жидкостях внутренних релаксационных процессов не выясненными.

При использовании уравнений обобщённой (релаксационной) гидродинамики, которые формулируются на основе общих и строгих методов неравновесной статистической теории жидких систем, материальные соотношения между потоками и градиентами по форме остаются такими же, как в обычной гидродинамике. Однако, в этом случае входящие в эти выражения коэффициенты переноса будут зависеть от радиуса действия градиентов и длительности их приложения. Это позволяет выйти за рамки сплошной среды и учесть роль молекулярной структуры в формировании переносных свойств жидкостей, расширить область применения законов гидродинамики от макроскопических до микроскопических масштабов.

Вместе с этим, проблема создания единой, последовательной и строгой молекулярно-статистической теории жидкостей, позволяющей качественно и количественно описать неравновесные свойства жидкостей при различных динамических процессах, пока далеко от завершения. Если молекулярно-статистическая теория простых жидких систем, опирающихся в основном на модель жидкостей, состоящих из упругих сферических молекул развита относительно хорошо, исследования динамических неравновесных свойств более сложных жидких систем, являются эпизодическими и находятся на стадии формирования.

В аспекте вышеизложенного анализа, как основными направлениями исследования настоящей диссертационной работы определены: формулировка более общей физической модели сложных жидких систем, чем модель жидкостей с упругими сферическими молекулами; построение последовательной, внутренне согласованной молекулярно-статистической теории сложных жидкостей; определение замкнутых систем уравнения обобщённой гидродинамики, позволяющее описать динамические процессы переноса в сложных жидких системах; исследование вклады особенностей структуры жидкостей, механизмов происходящих в них внутренних релаксационных процессов и характера внешних возмущений в динамические свойства параметров переноса, которые являются актуальными задачами физики жидкого состояния.

Степень изученности темы диссертации. Несмотря на трудности, связанные с особенностями структуры и свойства жидкостей (отсутствие простой идеальной модели, как модели идеального газа или идеального кристалла, отсутствие подходящего малого параметра, и т.д.) теория жидкого состояния сумела успешно развиваться. На начальных этапах исследования жидкость представляли, как плотный газ. Для описания свойства жидкостей использовали установленные для газов законы и уравнения.

Выяснилось, что вблизи точки плавления многие свойства жидкостей похожи на свойства твёрдых тел. На этой основе, почти параллельно появились и укреплялись представления, что жидкость это рыхлое твёрдое тело. Начинали развиваться разные квазикристаллические подходы в теории жидкостей

(«дырочная» теория или теория свободного объёма в их разнообразных вариантах) [5]. В целом, главная задача молекулярно-статистическая теория равновесного состояния жидкостей – установление связи между физическими свойствами равновесных теплофизических параметров жидкостей и особенностей их молекулярной структуры, в общем виде была решена.

Заметные успехи были достигнуты и в области создания статистической теории неравновесных процессов в жидкостях. Были выполнены многочисленные работы по усовершенствованию кинетического уравнения Больцмана для описания неравновесных свойств плотных газов и жидкостей. Удачными в этом направлении можно считать работы Энскога и его последователей, которыми были получены аналитические выражения для коэффициентов переноса, учитывающие размеры молекул и их взаимодействия.

С открытием ближнего радиального порядка в жидкостях начинали развиваться и новые молекулярно-статистические методы описания их свойств. Один из основных вариантов этих подходов является теория коррелятивных функции распределения молекул и связанный с ним метод кинетических уравнений. Главная идея этого подхода, заключается в отказе от попытки определения N – частичных функции распределения и определении одночастичных, двухчастичных, трёх-частичных и s -частичных функции распределения. Утверждается, что для описания теплофизических свойств жидкостей с учётом наличия в них ближнего радиального порядка, достаточно знание и использование одно-частичные и двух-частичные функции распределения молекул. Этот подход позволяет описать, как равновесные, так и неравновесные свойства в основном простых жидкостей. Для описания неравновесных свойств жидкостей в этих подходах, появляется необходимость формулировки кинетических уравнений (КУ) для одночастичных, двухчастичных и много-частичных коррелятивных функции распределения молекул, с учётом вкладов взаимодействия (флуктуации) различных масштабов

Начиная с 70-х годов прошлого века, в центре внимания специалистов находится относительно простой, современный, сравнимый по общности с методом кинетических уравнений, метод неравновесного статистического оператора (НСО) или метод неравновесной функции распределения (НФР) для классических систем. По мнению автора, этот метод не содержит некоторые ограничения, характерные другим методам молекулярно-статистического описания неравновесных свойств жидкостей. Его можно успешно применять и для описания неравновесных свойств жидкостей, состоящих из сложных молекул. Одной из главных задач диссертации является обобщение метода НФР для описания неравновесных теплофизических и переносных свойств сложных жидких систем.

Связь темы диссертации с выполнением государственных тем и научных программ: Результаты диссертации входили в итоговые и календарные отчёты плановых НИР кафедры физики Таджикского технического университета имени академика М.С. Осими, вошли в итоговые

отчёты государственных тем, приведённых в списке публикации по теме диссертации под номерами 33-А, 34-А, 35-А, 45-А.

Общая характеристика работы.

Основные цели исследования диссертации: - построение последовательной, внутренне согласованной молекулярно-статистической теории сложных жидких систем, состоящих из жёстких молекул произвольной формы, на основе обобщения метода НФР;

- формулировка и использование более общего, чем модель жидкостей из твёрдых сферических молекул, модель жидкости, состоящей из жёстких молекул произвольной формы, позволяющей описать явления переноса и релаксации в сложных асимметричных жидких системах;

- вывод замкнутых систем уравнения обобщённой гидродинамики и определение общих аналитических выражений для динамических параметров переноса асимметричных жидкостей; детализация и упрощение полученных результатов для описания явлений переноса и релаксации в конкретных классах жидкостей;

Для реализации отмеченных целей планировалась решение следующих задач:

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

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

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

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

- **провести** численные расчёты закономерностей зависимости динамических параметров переноса одноатомных и многоатомных жидкостей, а также нематических жидких кристаллов от температуры, плотности, давления

и частоты внешнего возмущения; сопоставить результаты с экспериментальными данными.

Объектами исследования являются сложные асимметричные жидкие системы, состоящие из жёстких молекул произвольной формы.

Предметами исследования являлись теоретические исследования и аналитические описания закономерностей зависимости основных параметров переноса и релаксации в сложных жидких системах, от изменения термодинамических параметров состояния и частоты внешнего возмущения в общем виде и для конкретного класса жидкостей.

Научная новизна полученных результатов.

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

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

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

3. **Сформулирована** замкнутая компактная система уравнений баланса динамических величин, характеризующих неравновесное состояние жидкой системы и выражение для НФР, которые позволяют корректно **учитывать вклады**, как **гидродинамических**, так и **релаксационных** источников в временные эволюции динамических параметров состояния жидкой системы, при равновесных, локально-равновесных и неравновесных процессах;

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

5. **Проведён** анализ молекулярных механизмов, происходящих в асимметричных жидкостях внутренних релаксационных процессов. **Показано**, что все содержащиеся в уравнениях обобщённой гидродинамики асимметричных жидкостей характерные времена релаксации, выражаются через три основные характерные времена - трансляционные (τ_t), вращательные

(τ_r) и прекрестные (τ_{tr}) релаксационные процессы.

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

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

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

8. **Показана** возможность существования дополнительных, связанных с не сферичностью молекул коэффициентов вязкости и динамических модулей упругости в многоатомных жидкостях. **Выявлено**, что в определении свойства динамических параметров переноса многоатомных жидкостей определяющую роль играют прекрёстные релаксационные процессы, но в них вносят вклад и все три имеющиеся в рассматриваемой жидкости релаксационные процессы. Кривые дисперсии параметров переноса многоатомных жидкостей содержат, как минимум **две релаксационные области** с характерными временами релаксации τ_{tr} и $\tau_{эф} = \frac{10}{3} (\tau_{tr})^2 \frac{\tau_t + \tau_r}{\tau_t \tau_r}$.

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

10. Термодинамическим методом **исследованы** ориентационные аномальные поведения равновесных теплофизических параметров НЖК в

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

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

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

13. Упрощённые, с учётом условия $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}} \cdot \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$ уравнения обобщенной гидродинамики, где определяющую роль играют вращательные релаксационные процессы, **использованы** для исследования динамических ориентационных процессов переноса массы и момента импульса в НЖК. **Получены** аналитические выражения и проведены численные расчёты закономерностей зависимости коэффициента вращательного внутреннего трения, характерного времени вращательной релаксации, коэффициентов вращательной подвижности, диффузии и термодиффузии, ориентационных вязкостей, а также соответствующих им динамических модулей упругости от температуры, плотности и давления. **Выявлены** качественные соответствия теоретических расчётов с экспериментальными результатами.

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

дифференциальным уравнением второго порядка гиперболического типа.

Теоретические и научно-практические значения результатов

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

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

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

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

Выявленная в диссертации связь теплофизических параметров и динамических коэффициентов переноса жидкостей с формой, размером, массой и энергией взаимодействия молекул, может быть использована, как физическая основа создания новых жидких материалов с заданными теплофизическими и другими физико-техническими свойствами.

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

Вносимые к защите положения:

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

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

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

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

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

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

Достоверность полученных в диссертации результатов обеспечивались использованием апробированных методов исследования, сопоставлением полученных результатов с результатами известных работ и с экспериментальными данными. Получением известных частных результатов из найденных общих выражений при предельных переходах.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности.

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

Личный вклад. Направление исследования, цели и задачи диссертационной работы сформулированы вместе с научным консультантом. Некоторые численные расчёты на компьютере проведены совместно с соискателями, аспирантами и соавторами опубликованных работ. Все остальные аналитические расчёты, выводы уравнения и их решения, анализ и оформления результатов в диссертации и в научных публикациях, результаты, отражённые в разделах «Научная новизна», «Теоретические и практические значения», «Положения, вносимые к защите», «Выводы и заключения» диссертации выполнены лично диссертантом.

Апробация и реализация результатов диссертации

Основные результаты диссертации были неоднократно обсуждены и получили одобрения на научных семинарах Физико-технического института (ФТИ) имени С.У. Умарова Национальной академии наук Таджикистана (НАНТ), Таджикского национального университета (ТНУ), Таджикского технического университета (ТТУ) имени академика М.С. Осими. Материалы диссертации были доложены на следующих Международных, всесоюзных и

республиканских научных, научно-практических конференциях: Конференсияи илмий байналмилалӣ «Физикаи муҳитҳои конденсӣ» бахшида ба 50-солагии Донишгоҳи давлатии миллии Тоҷикистон», 24-25 июни соли 1997, Душанбе; Международной конференции «Физика конденсированного состояния» посвящённой 70-летию академика А.А. Адхамова, 3–4 сентября 1998г. – ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе; Научно–теоретической конференции профессорско-преподавательского состава ТГНУ, посвящённой «Дню науки». – Душанбе. – 2000; Научно–практической конференции профессорско-преподавательского состава ТГНУ, посвящённое «Дню науки». – Душанбе. – 2001; Международной конференции «Физики конденсированного состояния. Душанбе, 11–12 октября 2001г.; Научно–теоретической конференции, посвящённой 50 -летию Таджикского национального университета. – Душанбе. – 1998; Международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем». 5–6 октября 2004г. ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе; 3rd International conference Physics of Liquids matter: modern problems. May 27–31, 2005, Kyiv, Ukraine; Международной конференции «Вклады Авиценны и Эйнштейна в развитии естествознания», посвящённая 100-летию СТО Эйнштейна. 7 ноября 2005 г. - Хатлонский госуниверситет имени Н. Хисрава. - Курган-Тюбе; Научно–теоретической конференции «Современные проблемы физики и астрофизики», посвящённой 100-летию СТО и 40-летию Физического факультета ТГНУ. 2005. Душанбе; Международной конференции «Физика конденсированного состояния и экологических систем», 30–31 октября 2006г. ФТИ имени С.У. Умарова. Душанбе; II Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования в XXI веке», 15–16 марта 2007. ТТУ им. академика М.С. Осими, Душанбе; III Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования в XXI веке». 22–24 мая 2008г. ТТУ им. академика М.С. Осими. Душанбе; VII Международной конференции «Лиотропные жидкие кристаллы и наноматериалы», 22–25 сентября 2009г. - Иваново (Россия); International Conference Physics of Liquids matter: modern problems. May 21–24, 2010. - Kyiv, Ukraine; EMLG–JMLG Annual Meeting 2010: Complex liquids. Modern trends in exploration, understanding and application. September 5–9, 2010. - L’viv, Ukraine; EMLG/JMLG Annual Meeting: New outlook on molecular liquids; from short scale to long scale dynamics. 11–15 September 2011. - Warsaw, Poland; EMLG/JMLG Annual Meeting: Molecular association in fluid faces and at fluid interfaces. 5–9 September 2012. Eger, Hungary; VIII Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования 3–4 ноября 2016. ТТУ им. академика М.С. Осими, Душанбе; VIII Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования», 3–4 ноября 2016г. - ТТУ им. академика М.С. Осими. Душанбе; Международной конференции “Проблемы современной физики” (посв. 110-летию академика С.У. Умарова и 90-летию академика А.А. Адхамова). ФТИ имени С.У. Умарова. Душанбе; Международной научно–практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана: проблемы и пути их решения». 19 декабря 2019г. - Филиал МЭИ в г. Душанбе; Международной научно–практической

конференции студентов, магистрантов, аспирантов и молодых учёных «Мухандис–201». Естественные науки. ТТУ им. академика М.С. Осими. Душанбе; Научно–практической конференции «Современные проблемы физики конденсированного состояния и ядерной физики». 19 февраля 2020 г. Таджикский национальный университет. Душанбе; Международной научно–практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана. Проблемы энергосбережения, энергоэффективности и использования возобновляемых источников энергии». 29–30 апреля 2021 г. Филиал МЭИ в г. Душанбе; Международной научно–практической конференции «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития», 12–13 ноября 2021г. - ТТУ им. академика М.С. Осими. –Душанбе; Республиканской научно–практической конференции “Наука–основа инновационного развития”. ТТУ им. академика М.С. Осими. 2022г. Душанбе; VIII Международной конференции «Современные проблемы физики». 21–22 октября 2022г.- ФТИ имени С.У. Умарова. Душанбе; VIII Республиканской научно–практической конференции «Наука основа инновационного развития». апрель 2023г. ТТУ им. академика М.С. Осими. Душанбе; Научно–практической конференции «Развитие и достижения физической науки в годы независимости». 25-26 августа 2023 г. ФТИ имени С.У. Умарова, Душанбе; Международной конференция «Современные технологии научного приборостроения и информационно–измерительных систем», 23 июня 2023г. Научно–технологический центр уникального приборостроения Российской Академии наук. Москва; Международной научной конференции «Физические и технические науки в пространстве СНГ». 29–30 ноября 2024г Душанбе, ФТИ имени С.У. Умарова; 14 Международной теплофизической школы (МТФШ-14) «Теплофизические исследования и возобновляемая энергетика» (ОНЛАЙН). 9-10 декабря 2024г. ТТУ им. академика М.С. Осими. Душанбе-Тамбов-Казань.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 86 научных работах, в том, числе в 32 реферируемых ВАК-ом при Президенте РТ журналах, список которых приведён в конце автореферата.

Объём и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка цитированной литературы. Основное содержание диссертации изложено на 253 страницах компьютерного набора, 52 рисунков и 40 таблиц. Список литературы содержит 304 ссылок.

Краткие содержания глав диссертации.

Во введение обоснована актуальность темы, определена цели и задачи диссертационной работы. Коротко анализирована состояние научных исследований по направлению темы диссертации, приведена научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, положения, вносимые к защите.

В первой главе проведён анализ состояния экспериментальных и теоретических работ по исследованию явлений переноса и релаксации в чистых однокомпонентных жидкостях. Здесь же приведена обоснование выбора темы диссертации и основные аналитические выражения, которые составляют методическую основу диссертации.

Во второй главе описываются используемые в диссертации основные понятия, определения, физическая модель, принципы и методы исследования явлений переноса и релаксации в сложных асимметричных жидких системах.

В первом параграфе главы обоснована необходимость формулировки системы уравнений обобщённой гидродинамики для исследования динамических процессов переноса в жидкостях. Показано, что если, в законах сохранения использовать известные экспериментальные выражения

$$\vec{J}_n(\vec{x}, t) = -D \frac{\partial n(\vec{x}, t)}{\partial \vec{x}}, \quad \sigma^{\alpha\beta}(\vec{x}, t) = -\eta \frac{\partial u^\alpha(\vec{x}, t)}{\partial x^\beta} \quad \text{и} \quad \vec{S}_e(\vec{x}, t) = -\lambda \frac{\partial T(\vec{x}, t)}{\partial \vec{x}}, \quad (1)$$

можно описать явление переноса в жидкостях в рамках обычной гидродинамики. Однако, при этом значения самих коэффициентов переноса – диффузии (D), вязкости (η), теплопроводности (λ) остаются неизвестными. При описании явления переноса уравнениями обобщённой (релаксационной) гидродинамики, которые формулируются на основе строгих методов молекулярно-статистической теории жидкостей, связь между потоками и градиентами остаются такими же как в (1), но потоки переноса будут релаксационными, а коэффициенты переноса будут зависеть от термодинамических параметров состояния и частоты динамического процесса. Такие, зависящие от частоты внешнего возмущения коэффициенты переноса в диссертации, называются динамическими коэффициентами переноса. Формулировка уравнения обобщённой гидродинамики и определение динамических коэффициентов переноса для сложных асимметричных жидких систем, определяется, как одна из основных задач диссертации.

Во втором параграфе главы, представлена более общая физическая модель асимметричных жидкостей, а также методы и принципы её описания.

Рассмотрена жидкая система, состоящая из N одинаковых жёстких молекул произвольной формы с массами m и моментом инерции I . Для описания состояния таких несферических молекул в фазовом пространстве, использован набор декартовых ($x; y; z$) и угловых ($\theta; \psi; \varphi$) координат, а также соответствующие им компоненты импульса $\{p_{xi}; p_{yi}; p_{zi}\}$ и собственного момента импульса молекул $\{M_{xi}; M_{yi}; M_{zi}\}$. Полагается, что такие молекулы обладают поступательными и вращательными степенями свободы свойства, которые можно описать законами классической физики.

Микроскопическая модель жидкой системы задаётся Гамильтонианом

$$H(\vec{x}_i, \vec{\theta}_i, \vec{p}_i, \vec{M}_i) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{2I_{\alpha\beta}} + \sum_{i \neq j=1}^N \Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j) \right), \quad (2)$$

где: $\Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j)$ – парный, но несферический потенциал взаимодействия молекул жидкости; $\vec{p}_i^\alpha = p_i^\alpha - m u^\alpha(\vec{x}, t)$ и $\vec{M}_i^\alpha = M_i^\alpha - I_{\alpha\beta} \omega^\beta(\vec{x}, t)$ – импульс и момент импульса молекул в сопровождающей жидкости системе координат; $u^\alpha(\vec{x}, t)$ и $\omega^\beta(\vec{x}, t)$ – макроскопические скорости поступательного и вращательного движения жидкости. Уравнение движения молекул в фазовом пространстве представлены уравнениями движения в Гамильтоновой форме.

Неравновесное состояние жидкой системы определяется набором динамических величин локальной плотности, которые определяются выражением

$$\hat{P}_m(\vec{x}, \vec{\theta}) = \sum_i^N P_{mi} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_i), \quad (3)$$

где, P_{mi} - микроскопическое выражение данной динамической величины.

Изменение состояния жидкой системы при динамических процессах, описывается уравнениями изменения $\hat{P}_m$ по времени, которые записываются в виде общих законов сохранения

$$\frac{\partial \hat{P}_m}{\partial t} = \frac{\partial \hat{j}_{mt}^\alpha}{\partial x^\alpha} - \frac{\partial (a^{\alpha\beta} \hat{j}_{mr}^\beta)}{\partial \theta^\alpha} + \hat{I}_m, \quad (4)$$

где $\hat{j}_{mt}^\alpha$ и $\hat{j}_{mr}^\beta$ – плотностей потоков переноса $\hat{P}_m$, обусловленные трансляционными (t) и вращательными (r) степенями свободы молекул, а $\hat{I}_m$ внутренний источник изменения $\hat{P}_m$. Если, $\hat{P}_m$ сохраняющаяся величина, $\hat{I}_m \equiv 0$.

С учётом того, что в диссертации используются всего две сохраняющиеся величины в качестве несохраняющихся динамических величин характеризующие неравновесное состояние жидкости используются потоки этих сохраняющихся величин. Уравнение типа (4) для сохраняющихся и не сохраняющихся величин записывается отдельно, в виде

$$\frac{\partial \hat{P}_m(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + \vec{\nabla}_{\vec{x}, \vec{\theta}} \hat{j}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta}) = 0, \quad \frac{\partial \hat{j}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} = \hat{A}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta}) + \hat{I}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta}), \quad (5)$$

где

$$\hat{A}_{m, tr} = -M_{t, r, tr} \vec{\nabla}_{\vec{x}, \vec{\theta}} \hat{P}_m(\vec{x}, \vec{\theta}), \quad \hat{I}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta}) = -\frac{\hat{j}_{m, tr, tr}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\tau_{m, tr, tr}} \quad (5a)$$

- соответствующие гидродинамические и релаксационные источники, $M_{t, r, tr}$ - обобщённый модуль упругости и $\tau_{m, tr, tr}$ характерное время релаксации обусловленные трансляционными (t), вращательными (r) степенями свободы молекул и их взаимодействиями (tr). Заметим, что запись законов сохранения в виде (5) имеет ряд преимуществ. В частности, на основе этих уравнений схематически, в общем виде, можно оценить ряд важных свойств жидких систем. Например, для стационарных процессов, когда $\frac{\partial \hat{j}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} = 0$, для соответствующих потоков получим $\hat{j}_{m, tr} = \tau_{m, tr, tr} \hat{A}_{m, tr} = -\tau_{m, tr, tr} M_{t, r, tr} \vec{\nabla}_{\vec{x}, \vec{\theta}} \hat{P}_m$, которое подтверждает, что $M_{t, r, tr}$ – является обобщённым модулем упругости, а $\tau_{m, tr, tr} M_{t, r, tr}$ – обобщённым коэффициентом переноса. Подставляя Фурье – образ $\hat{j}_{m, tr}(v)$ из второго уравнения (5a) в первое только с учётом трансляционных степеней свободы получим уравнение переноса в виде

$$(1 + iv\tau_{mt}) \frac{\partial \hat{P}_m(\vec{x}, v)}{\partial t} = \tau_{mt} M_t \frac{\partial^2 \hat{P}_m(\vec{x}, v)}{\partial \vec{x}^2}. \quad (6)$$

Из уравнение (6) легко показать, что при низкочастотных динамических процессах ($v\tau_{mt} \rightarrow 0$) перенос величины $\hat{P}_m(\vec{x})$ характеризуется стационарным значением коэффициента переноса $D_t = \tau_{mt} M_t$ и уравнение переноса (6) становится дифференциальным уравнением второго порядка в частных производных параболического типа $\frac{\partial \hat{P}_m(\vec{x})}{\partial t} = D_t \frac{\partial^2 \hat{P}_m(\vec{x})}{\partial \vec{x}^2}$. Механизм переноса в этом случае будет диффузионным. При высокочастотных динамических процессах ($v\tau_{mt} \rightarrow \infty$), уравнение переноса (6) становится дифференциальным уравнением второго порядка в частных производных гиперболического типа $\frac{\partial^2 \hat{P}_m(\vec{x})}{\partial t^2} = M_t \frac{\partial^2 \hat{P}_m(\vec{x})}{\partial \vec{x}^2}$, процесс переноса описывается высокочастотными значениями модуля упругости M_t , механизм переноса является волновым. Эти

примеры показывают, что диффузионно-волновые механизмы переноса содержатся в исходных схемах и уравнениях диссертации.

Чтобы из уравнения типа (4) - (6) получить уравнения обобщённой гидродинамики и исследовать явлений переноса и релаксации в асимметричных жидкостях, необходимо усреднить эти уравнения по соответствующему статистическому ансамблю. В конце параграфа приведено обобщённое, с учётом (6) выражение НФР из работы

$$f(t) = f_L + f_t, \quad (7)$$

где f_L и f_t – локально-равновесное и осциллирующие части НФР.

В соответствие с работой при статистических усреднениях полагается выполнение тождества: $\langle \hat{P}_m \rangle_f = \langle \hat{P}_m \rangle_L$; $\langle \hat{A} \rangle_f = \langle \hat{A} \rangle_L$; $\langle \hat{I}_m \rangle_f = \langle \hat{I}_m \rangle_t$; $\langle \hat{I}_m \rangle_L = 0$; $\langle \frac{\partial \hat{P}_m}{\partial x} \rangle_f \approx \frac{\partial \langle \hat{P}_m \rangle_f}{\partial x}$; $\langle \frac{\partial \hat{P}_m}{\partial \theta} \rangle_f \approx \frac{\partial \langle \hat{P}_m \rangle_f}{\partial \theta}$; $\langle \frac{\partial \hat{P}_m}{\partial t} \rangle_f \approx \frac{\partial \langle \hat{P}_m \rangle_f}{\partial t}$; $\hat{P}_m > \frac{\partial \hat{P}_m}{\partial x}$; $\frac{\partial \langle \hat{A} \hat{P}_m \rangle}{\partial \theta}$; $F_m > \frac{\partial F_m}{\partial x}$, $\frac{\partial F_m}{\partial t}$, $\frac{\partial \hat{P}_m}{\partial t} \sim \frac{\hat{P}_m}{\tau_m} \gg \hat{P}_m$.

В третьем параграфе, определена замкнутая система уравнения эволюции динамических величин, характеризующих неравновесное состояние жидкой системы. В рассматриваемой модели жидкости две сохраняющиеся динамические величины – динамическая плотность число частиц –

$$\hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_i) \quad (8a)$$

и динамическая плотность внутренней энергии –

$$\hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta}) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{2I_{\alpha\beta}} + \sum_{i \neq j=1}^N \Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j) \right) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_i). \quad (8b)$$

Дифференцируя (8) по времени, получим цепочку уравнения баланса динамических величин, характеризующих неравновесное состояние жидкости

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + \frac{\partial (\hat{I}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) + u^\alpha(\vec{x}, t) \hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta}))}{\partial x^\alpha} + \frac{\partial (a^{\alpha\beta} (j_r^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) + \omega^\beta(\vec{x}, t) \hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta})))}{\partial \theta^\alpha} = 0, \\ & \frac{\partial \hat{I}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + \hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{du^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x^\beta} (\hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) + m \hat{J}_t^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) u^\alpha(\vec{x}, t)) + \\ & + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial \theta^\beta} (a^{\beta\gamma} (\hat{P}_{tr}^{\alpha\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}) + m \hat{J}_t^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) \omega^\gamma(\vec{x}, t))) + \hat{J}_t^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial u^\alpha(\vec{x}, t)}{\partial x^\beta} = \hat{I}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}), \\ & \frac{\partial \hat{J}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + I_{\alpha\beta}^{-1} \frac{\partial}{\partial x^\gamma} (\hat{P}_{rt}^{\gamma\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) + I_{\beta\sigma} \hat{J}_r^\sigma(\vec{x}, \vec{\theta}) u^\gamma(\vec{x}, t)) + \vec{n}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{d\omega^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \\ & + J_t^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial \omega^\alpha(\vec{x}, t)}{\partial x^\gamma} + I_{\alpha\beta}^{-1} \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} (a^{\gamma\sigma} (\hat{P}_r^{\sigma\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) + I_{\beta\rho} \hat{J}_r^\rho(\vec{x}, \vec{\theta}) \omega^\sigma(\vec{x}, t))) = \hat{I}_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}). \\ & \frac{\partial \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + m \hat{J}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{du^\beta(\vec{x}, t)}{dt} + m \hat{J}_t^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{du^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \frac{\partial \hat{S}_t^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial x^\gamma} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x^\gamma} (u^\gamma(\vec{x}, t) \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})) + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} (a^{\gamma\sigma} \hat{S}_t^{\alpha\beta\sigma}(\vec{x}, \vec{\theta})) + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} (a^{\gamma\sigma} \omega^\sigma(\vec{x}, t) \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})) + \\ & + \hat{P}_t^{\alpha\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial u^\beta(\vec{x}, t)}{\partial x^\gamma} + \hat{P}_t^{\alpha\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial u^\gamma(\vec{x}, t)}{\partial x^\beta} = \hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \\ & \frac{\partial \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + I_{\alpha\lambda} \hat{J}_r^\lambda(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{du^\beta(\vec{x}, t)}{dt} + I_{\beta\rho} \hat{J}_t^\rho(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{d\omega^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \frac{\partial \hat{R}_t^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial x^\gamma} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x^\gamma} (u^\gamma(\vec{x}, t) \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})) + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} (a^{\gamma\sigma} \hat{R}_t^{\alpha\beta\sigma}(\vec{x}, \vec{\theta})) + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} (a^{\gamma\sigma} \omega^\sigma(\vec{x}, t) \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})) + \\ & + \hat{P}_{rt}^{\alpha\lambda}(\vec{x}, \vec{\theta}) I_{\beta\rho} \frac{\partial \omega^\rho(\vec{x}, t)}{\partial x^\lambda} + \hat{P}_{rt}^{\alpha\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial u^\beta(\vec{x}, t)}{\partial x^\gamma} = \hat{I}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \\ & \frac{\partial \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + I_{\gamma\beta} \hat{J}_r^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{d\omega^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \hat{J}_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) I_{\gamma\beta} \frac{d\omega^\gamma(\vec{x}, t)}{dt} + \frac{\partial \hat{\pi}^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial}{\partial x^\gamma} (u^\gamma(\vec{x}, t) \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})) + \\ & + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} (a^{\gamma\sigma} \pi_r^{\alpha\beta\sigma}(\vec{x}, \vec{\theta})) + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} (a^{\gamma\sigma} \omega^\sigma(\vec{x}, t) \hat{P}_r^{\alpha\beta}) + \hat{P}_{tr}^{\beta\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial \omega^\alpha(\vec{x}, t)}{\partial x^\gamma} + \hat{P}_{rt}^{\alpha\gamma} \frac{I_{\beta\sigma}}{m} \frac{\partial \omega^\sigma(\vec{x}, t)}{\partial x^\gamma} = \\ & \hat{I}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}). \\ & \frac{\partial \hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + m \hat{J}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{du^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + I_{\alpha\beta} \hat{J}_r^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{d\omega^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \frac{\partial}{\partial x^\gamma} (u^\gamma(\vec{x}, t) \hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta}) + S_t^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta})) + \\ & + \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial u^\beta(\vec{x}, t)}{\partial x^\alpha} + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} (a^{\gamma\beta} (\omega^\beta(\vec{x}, t) \hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta}) + \hat{S}_r^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}))) + \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial \omega^\beta(\vec{x}, t)}{\partial x^\alpha} = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь:

$$\begin{aligned}
f_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \frac{p_i^\alpha}{m} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_i); \\
f_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \frac{\vec{M}_i^\beta}{I_{\alpha\beta}} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_i); \\
\hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^\alpha p_i^\beta}{m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N F_{ij}^\alpha x_{ij}^\beta \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}); \\
\hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{I_{\beta\gamma}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N N_{ij}^{1\alpha} b_i^{\beta\gamma} \theta_{ij}^\gamma \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}); \\
\hat{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \frac{p_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{I_{\beta\gamma}} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}); \\
\hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \frac{\vec{M}_i^\alpha p_i^\beta}{m} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}), \quad \hat{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) = \frac{m}{I_{\beta\gamma}} \cdot \hat{P}_{rt}^{\alpha\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}); \\
\hat{S}_t^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left\{ \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{2I_{\alpha\beta}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j) \right) \frac{p_i^\gamma}{m} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{4} \sum_{j \neq i=1}^N [F_{ij}^\alpha \frac{(p_i^\alpha + p_j^\alpha)}{m} x_{ij}^\gamma] \right\} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}), \\
\hat{S}_r^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left\{ \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{2I_{\alpha\beta}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j) \right) I_{\gamma\sigma}^{-1} \vec{M}_i^\sigma + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{4} \sum_{j \neq i=1}^N (N_{ij}^\alpha - [\vec{x}_{ij} \vec{F}_{ij}]^\alpha) I_{\alpha\sigma}^{-1} (\vec{M}_i^\sigma + \vec{M}_j^\sigma) b_i^{\gamma\rho} \theta_{ij}^\rho \right\} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta})
\end{aligned} \tag{10}$$

- динамические плотности потоков: переноса число частиц ($f^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})$); переноса импульса и момента импульса ($\hat{P}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})$); и переноса энергии (тепла) ($\hat{S}^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})$), обусловленные поступательными (t), вращательными (r) степенями свободы молекул и их взаимодействиями (tr), соответственно. Аналогично:

$$\begin{aligned}
\hat{I}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \frac{\hat{F}^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})}{m} = \frac{1}{m} \sum_{l=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N F_{ij}^\alpha \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) - \\
&\quad - \frac{1}{m} \langle \sum_{l=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N F_{ij}^\alpha \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) \rangle_L; \\
\hat{I}_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \frac{\hat{N}^\beta(\vec{x}, \vec{\theta})}{I_{\alpha\beta}} = \frac{1}{I_{\alpha\beta}} \sum_{l=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N N_{ij}^\beta \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) - \\
&\quad - \frac{1}{I_{\alpha\beta}} \langle \sum_{l=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N N_{ij}^\beta \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) \rangle_L; \\
\hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \frac{1}{2m} \sum_{l=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(F_{ij}^\alpha p_{ij}^\beta + F_{ij}^\beta p_{ij}^\alpha \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) - \\
&\quad - \frac{1}{2m} \langle \sum_{l=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(F_{ij}^\alpha p_{ij}^\beta + F_{ij}^\beta p_{ij}^\alpha \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) \rangle_L; \\
\hat{I}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= -\frac{1}{2m} \sum_{l=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(F_{ij}^\alpha M_{ij}^\beta + N_{ij}^\beta p_{ij}^\alpha \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) - \\
&\quad - \frac{1}{2m} \langle \sum_{l=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(F_{ij}^\alpha M_{ij}^\beta + N_{ij}^\beta p_{ij}^\alpha \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) \rangle_L; \\
\hat{I}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \frac{1}{2I_{\alpha\lambda}} \sum_{l=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(N_{ij}^\lambda M_{ij}^\beta + M_{ij}^\lambda N_{ij}^\beta \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) - \\
&\quad - \frac{1}{2I_{\alpha\lambda}} \langle \sum_{l=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(N_{ij}^\lambda M_{ij}^\beta + M_{ij}^\lambda N_{ij}^\beta \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) \rangle_L.
\end{aligned} \tag{11}$$

- являются релаксационными источниками временного изменения не сохраняющихся динамических величин $f^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})$ и $\hat{P}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})$. Чтобы замкнуть систему уравнения (9), в уравнениях для тензоров $\hat{P}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})$ использовали приближенные выражения $\hat{S}^{\alpha\beta\gamma}$, $\hat{R}^{\alpha\beta\gamma}$, $\hat{\pi}^{\alpha\beta\gamma} \approx \frac{1}{5} (\hat{S}_t^\alpha \delta_{\beta\gamma} + \hat{S}_t^\beta \delta_{\alpha\gamma} + \hat{S}_t^\gamma \delta_{\alpha\beta})$. Система уравнений (7) - (11) составляют основу исследования явлений переноса в рассматриваемой модели жидкости.

В четвертом и пятом параграфах второй главы, исходя из (6) с учётом (7)-(11) формулируется локально - равновесная статистическая функция распределения (f_L) и осциллирующая часть НФР (f_t) в виде

$$f_L = f_0 \left[1 - \phi - d_t^\alpha(\vec{x}, t) \bar{J}_t^\alpha(t) - d_r^\alpha(\vec{x}, t) \bar{J}_r^\alpha(t) - \xi_t^{\alpha\beta}(x, t) \bar{P}_t^{\alpha\beta}(t) - \right. \\ \left. - \xi_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, t) \bar{P}_{tr}^{\alpha\beta}(t) - \xi_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, t) \bar{P}_r^{\alpha\beta}(t) - q_t^\alpha(\vec{x}, t) \bar{S}_t^\alpha(t) - q_r^\alpha(\vec{x}, t) \bar{S}_r^\alpha(t) \right], \quad (12)$$

$$f_t = f_0(\phi^t - \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t_i} dt_1 [d_t^\alpha(\vec{x}, t + t_1) \frac{\bar{F}^\alpha(t_1)}{m} + d_r^\alpha(\vec{x}, t + t_1) I_{\alpha\beta}^{-1} \bar{N}^\beta(t_1) + \xi_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, t + t_1) \bar{I}_t^{\alpha\beta}(t_1) + \\ + \xi_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, t + t_1) \bar{I}_{tr}^{\alpha\beta}(t_1) + \xi_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, t + t_1) \bar{I}_r^{\alpha\beta}(t_1) + q_t^\alpha(\vec{x}, t + t_1) \bar{K}_t^\alpha(t_1) + \\ q_r^\alpha(x, t + t_1) \bar{K}_r^\alpha(t_1)]), \quad (13)$$

где

$$f_0 = \frac{e^{-\beta(\vec{x}, t)(H - \mu(\vec{x}, t)N)}}{\int \dots \int e^{-\beta(\vec{x}, t)(H(t) - \mu(\vec{x}, t)N)} d\Gamma} \quad (14)$$

- локально-равновесная статистическая функция распределения Гиббса. Выражения ϕ и ϕ^t приведены в диссертации.

Исходя из условия $\langle \bar{P}_m \rangle_f = \langle \bar{P}_m \rangle_L$, и предполагая, что переносы массы, импульса и тепла независимы, в линейном приближении для входящих в (12) и (13) неизвестных макроскопических параметров получены равенства

$$d_t^\beta = \frac{J_t^\alpha}{\langle J_t^\alpha \bar{J}_t^\beta(t) \rangle_0}; \quad d_r^\beta = \frac{J_r^\alpha}{\langle J_r^\alpha \bar{J}_r^\beta(t) \rangle_0}; \quad q_t^\beta = \frac{S_t^\alpha}{\langle \xi_t^\alpha \bar{S}_t^\beta(t) \rangle_0}; \quad q_r^\beta = \frac{S_r^\alpha}{\langle \xi_r^\alpha \bar{S}_r^\beta(t) \rangle_0}; \\ \xi_t^{\gamma\sigma} = \frac{-\bar{P}_t^{\alpha\beta}}{\langle \bar{P}_t^{\alpha\beta} \bar{P}_t^{\gamma\sigma}(t) \rangle_0}; \quad \xi_r^{\gamma\sigma} = \frac{-\bar{P}_r^{\alpha\beta}}{\langle \bar{P}_r^{\alpha\beta} \bar{P}_r^{\gamma\sigma}(t) \rangle_0}; \quad \xi_{tr}^{\gamma\sigma} = \frac{-\bar{P}_{tr}^{\alpha\beta}}{\langle \bar{P}_{tr}^{\alpha\beta} \bar{P}_{tr}^{\gamma\sigma}(t) \rangle_0}. \quad (15)$$

Выражение (6), с учётом выражения (12), (13), (15) и условия $\bar{P}_m \ll \frac{\partial \bar{P}_m}{\partial t}$, можно записать в более общем и компактном виде

$$f(t) = f_L \left\{ 1 - \phi^t - \Sigma_m \iint d\vec{x} d\vec{\theta} \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t_1} \left(F_m(\vec{x}, t + t_1) \bar{I}_m(\vec{x}, \vec{\theta}, t_1) \right) dt_1 \right\}. \quad (16)$$

В первом параграфе третьей главы статистическим усреднением системы уравнения (7) – (11), по НФР (16), получена замкнутая система уравнения обобщенной гидродинамики для плотностей компонентов векторов потока массы J^α и тензоров напряжений

$$\sigma^{\alpha\beta} = -P^{\alpha\beta} + P \delta^{\alpha\beta} \quad (17)$$

$$\frac{\partial J_t^\alpha}{\partial t} = A_t^\alpha + I_t^\alpha; \quad \frac{\partial J_r^\alpha}{\partial t} = A_r^\alpha + I_r^\alpha \quad (18)$$

$$\frac{\partial \sigma_t^{\alpha\beta}}{\partial t} + A_t^{\alpha\beta} = I_t^{\alpha\beta}; \quad \frac{\partial \sigma_r^{\alpha\beta}}{\partial t} + A_r^{\alpha\beta} = I_r^{\alpha\beta}; \quad \frac{\partial \sigma_{tr}^{\alpha\beta}}{\partial t} = I_{tr}^{\alpha\beta}, \quad (19)$$

где:

$$A_t^\alpha = -n \frac{du^\alpha}{dt} - M_t^D \frac{\partial n}{\partial x^\alpha} - M_t^{TD} \frac{\partial T}{\partial x^\alpha}; \quad A_r^\alpha = -n \frac{d\omega^\alpha}{dt} - M_r^D \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} (a^{\alpha\gamma} n) - M_r^{TD} \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} (a^{\alpha\gamma} T); \\ A_t^{\alpha\beta} = -\mu_{ts}^t \left\{ \frac{\partial u^\alpha}{\partial x^\beta} \right\} - \mu_{tv}^t \delta^{\alpha\beta} \left\{ \frac{\partial u^\gamma}{\partial x^\gamma} \right\} - \mu_{bv}^t \delta^{\alpha\beta} \frac{\partial (a^{\gamma\rho} \omega^\rho)}{\partial \theta^\gamma} - \mu_{bs}^t \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (rot \vec{u})^\gamma \quad (20)$$

$$A_r^{\alpha\beta} = -\mu_{ts}^r \left\{ \frac{\partial u^\alpha}{\partial x^\beta} \right\} - \mu_{tv}^r \delta^{\alpha\beta} \left\{ \frac{\partial u^\gamma}{\partial x^\gamma} \right\} - \mu_{rv}^r \delta^{\alpha\beta} \frac{\partial (a^{\gamma\rho} \omega^\rho)}{\partial \theta^\gamma} - \mu_{bs}^r \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (rot \vec{u})^\gamma.$$

- соответствующие гидродинамические источники, а

$$M_t^D = \frac{1}{m} \left(\frac{\partial P_t}{\partial n} \right)_T; \quad M_t^{TD} = \frac{1}{m} \left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_n; \quad M_r^D = \frac{1}{I} \left(\frac{\partial P_r}{\partial n} \right)_T; \quad M_r^{TD} = \frac{1}{I} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_n \\ \mu_{ts}^t = \left[P_t - \frac{P_t}{c_v} \left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_n \right]; \quad \mu_{tv}^t = \left[\frac{5}{2} P_t - n \left(\frac{\partial P_t}{\partial n} \right)_T - \frac{(e + P_t)}{c_v} \left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_n \right]; \\ \mu_{ts}^t = \frac{1}{2} \frac{P_t}{c_v} \left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_n; \quad \mu_{tv}^t = \left[P_t - n \left(\frac{\partial P_t}{\partial n} \right)_T - \frac{e}{c_v} \left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_n \right] \\ \mu_{ts}^r = \frac{P_t}{c_v} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_n; \quad \mu_{tv}^r = \left[P_r - n \left(\frac{\partial P_r}{\partial n} \right)_T - \frac{(e + P_t)}{c_v} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_n \right] \\ \mu_{ts}^r = \frac{1}{2} \frac{P_t}{c_v} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_n; \quad \mu_{tv}^r = \left[P_r - n \left(\frac{\partial P_r}{\partial n} \right)_T + \frac{e}{c_v} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_n \right] \quad (21)$$

- модулей диффузионной (M^D), термодиффузионной (M^{TD}), сдвиговой (μ_s), объёмной (μ_v) упругости жидкости обусловленные поступательными (t),

вращательными (r) степенями свободы молекул и их взаимодействиями (tr), которые определены во втором параграфе главы.

Входящие в (21) значения плотность внутренней энергии e и давления P_t, P_r , а также их производные можно определить исходя из калорического и термического уравнения состояния жидкости

$$e(T, n) = \langle \hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_o = 3nk_B T + \frac{n^2}{2} \int \Phi_{ij}(x_{ij}) g_o(x_{ij}, \theta_{ij}) d\vec{x}_{ij} \quad (22a)$$

$$\left. \begin{aligned} P_t(T, n) \\ P_r(T, n) \end{aligned} \right\} = \frac{1}{3} \left\{ \begin{aligned} \langle \hat{P}_t^{\alpha\alpha}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_o \\ \langle \hat{P}_r^{\alpha\alpha}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_o \end{aligned} \right\} = nk_B T - \frac{n^2}{6} \int \left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_{ij})}{\partial x_{ij}} x_{ij} \\ \bar{B} \frac{\partial \Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_{ij})}{\partial \theta_{ij}} \theta_{ij} \end{aligned} \right\} g_o(x_{ij}, \theta_{ij}) d\vec{x}_{ij} d\vec{\theta}_{ij}, \quad (22b)$$

Согласно (20) – (22) задачи исследования неравновесных теплофизических и упругих свойств жидкостей сводятся к задаче определения (выбора) потенциала межмолекулярного взаимодействия молекул ($\Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_{ij})$) и равновесной радиальной функции распределения молекул ($g_o(x_{ij}, \theta_{ij})$). Заметим, что, умножая (21) на характерные времена релаксации получим выражения, для соответствующих этим модулям упругости стационарных значений коэффициентов переноса.

В третьем параграфе главы, в рамках НФР (16) определены релаксационные источники системы уравнения (18)-(19)

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_t^{\alpha}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_t &= \frac{F^{\alpha}}{m} = -B_t^{\alpha\beta} J_t^{\beta} - B_{tr}^{\alpha\beta} J_r^{\beta}; \quad \langle \hat{I}_r^{\alpha}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_t = \frac{N^{\alpha}}{I} = -B_r^{\alpha\beta} J_r^{\beta} - B_{rt}^{\alpha\beta} J_t^{\beta}; \\ \langle \hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_t &= -B_{tt}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_t^{\gamma\rho} - B_{ttr}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_{tr}^{\gamma\rho}; \quad \langle \hat{I}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_t = -B_{rtr}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_{tr}^{\gamma\rho} - B_{rr}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_r^{\gamma\rho}; \\ \langle \hat{I}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_t &= -B_{trtr}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_{tr}^{\gamma\rho} - B_{trr}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_r^{\gamma\rho} - B_{trt}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_t^{\gamma\rho} \end{aligned} \quad (23)$$

Входящие в (23) коэффициенты B имеют размерность обратного размера времени и $B^{-1} = \tau$ представляют соответствующие времена релаксации, которые являются сложными тензорами второго и четвёртого ранга. В частности, в упрощённом виде $B_{tt}^{\alpha\beta\gamma\rho} = \frac{\int_0^t \langle \hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \hat{I}_t^{\gamma\mu}(t') \rangle_o dt'}{\langle \hat{P}_t^{\mu\nu}(\vec{x}, \vec{\theta}) \hat{P}_t^{\nu\sigma}(t) \rangle_o}$.

Проведён детальный анализ внутренних термических релаксационных процессов и выявлен, что все входящие в (23) характерные времена релаксации $\tau = B^{-1}$ выражаются через три основных характерных времени: трансляционное τ_t ; вращательное τ_r ; и перекрёстное τ_{tr} релаксации следующим образом:

$$\tau_{tt} = \frac{5}{3} \tau_t; \tau_{rr} = \frac{5}{3} \tau_r; \tau_{ttr} = \tau_{rtr} = 2 \sqrt{\frac{m}{I}} \tau_{tr}; \tau_{trt} = \tau_{trr} = \frac{10}{3} \sqrt{\frac{I}{m}} \tau_{tr}; \tau_{trtr} = \frac{4\tau_t\tau_r}{\tau_t + \tau_r},$$

где

$$\tau_t = \frac{m}{\beta_t} = \frac{3mk_6 T}{\int_0^t dt' \langle F(0)F(t') \rangle_o}; \tau_r = \frac{m}{\beta_r} = \frac{3Ik_6 T}{\int_0^t dt' \langle N(0)N(t') \rangle_o}; \tau_{tr} = \frac{\sqrt{Im}}{\beta_{tr}} = \frac{3\sqrt{mIk_6 T}}{\int_0^t dt' \langle F(0)N(t') \rangle_o}. \quad (24)$$

Согласно (24), характерные времена релаксации выражаются через равновесные корреляторы $\langle F(0)F(t') \rangle_o$, $\langle N(0)N(t') \rangle_o$, $\langle F(0)N(t') \rangle_o$. Это означает, что на промежутках между столкновениями на молекулы со стороны соседних молекул действуют случайные силы $F(t')$, и случайные моменты сил $N(t')$, которые делают их поступательные и вращательные движения с «трением»; в результате происходит диссипация энергии и образуется необратимость явлений переноса, которые учитываются соответствующими характерными временами релаксации.

Поставляя (23) с учетом (24) в (18) - (19), получим замкнутые системы

уравнения обобщённой гидродинамики для векторов переноса массы J^α и тензоров напряжений $\sigma^{\alpha\beta}$ обусловленные поступательными (t), вращательными (r) степенями свободы молекул и их взаимодействиями (tr):

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_t^\alpha}{\partial t} + \frac{J_t^\alpha}{\tau_r} + \sqrt{\frac{I}{m}} \frac{J_r^\alpha}{\tau_{tr}} &= A_t^\alpha; \quad \frac{\partial J_r^\alpha}{\partial t} + \sqrt{\frac{m}{I}} \frac{J_t^\alpha}{\tau_{tr}} + \frac{J_r^\alpha}{\tau_r} = A_r^\alpha; \\ \frac{\partial \sigma_t^{\alpha\beta}}{\partial t} + \frac{\sigma_t^{\alpha\beta}}{\tau_{tt}} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{I}{m}} \frac{\sigma_{tr}^{\alpha\beta}}{\tau_{tr}} &= A_t^{\alpha\beta}; \quad \frac{\partial \sigma_r^{\alpha\beta}}{\partial t} + \frac{\sigma_r^{\alpha\beta}}{\tau_{rr}} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{I}{m}} \frac{\sigma_{tr}^{\alpha\beta}}{\tau_{tr}} = A_r^{\alpha\beta}; \\ \frac{\partial \sigma_{tr}^{\alpha\beta}}{\partial t} + \frac{\sigma_{tr}^{\alpha\beta}}{\tau_{tr}} + \frac{3}{10} \sqrt{\frac{m}{I}} \frac{\sigma_r^{\alpha\beta}}{\tau_{tr}} + \frac{3}{10} \sqrt{\frac{m}{I}} \frac{\sigma_t^{\alpha\beta}}{\tau_{tr}} &= 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Система уравнений (25) является основной системой уравнений обобщённой гидродинамики для исследования динамических процессов переноса массы, импульса и момента импульса в асимметричных жидких системах состоящих из жёстких молекул произвольной формы. Для практического использования удобнее писать (25) в Фурье образах, в виде:

$$J_t^\alpha (1 + i\nu\tau_t) + \sqrt{\frac{I}{m}} \frac{\tau_t}{\tau_{tr}} J_r^\alpha = \tau_t A_t^\alpha; \quad J_r^\alpha (1 + i\nu\tau_r) + \sqrt{\frac{m}{I}} \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} J_t^\alpha = \tau_r A_r^\alpha; \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \sigma_t^{\alpha\beta} (1 + i\nu\tau_{tt}) + \frac{1}{2} \frac{\tau_{tt}}{\tau_{tr}} \sqrt{\frac{I}{m}} \sigma_{tr}^{\alpha\beta} &= \tau_{tt} A_t^{\alpha\beta}; \quad \sigma_r^{\alpha\beta} (1 + i\nu\tau_{rr}) + \frac{1}{2} \frac{\tau_{rr}}{\tau_{tr}} \sqrt{\frac{I}{m}} \sigma_{tr}^{\alpha\beta} = \tau_{rr} A_r^{\alpha\beta} \\ \sigma_{tr}^{\alpha\beta} (1 + i\nu\tau_{tr}) + \frac{3}{10} \sqrt{\frac{m}{I}} \frac{\tau_{tr}}{\tau_{tr}} (\sigma_t^{\mu\nu} + \sigma_r^{\mu\nu}) &= 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Гидродинамические источники A в (25)-(27) определяются выражениями (20).

В четвертом параграфе третьей главы показано, что полученные уравнения являются более общими и содержат результаты известных в литературе работ. В частности, решая упрощённые уравнения (23) относительно векторов потока переноса массы, получены

$$\begin{aligned} J_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t) &= \Delta_t F^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t) - \Delta_{tr} N^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t) \\ J_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t) &= \Delta_r N^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t) - \Delta_{rt} F^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t), \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\Delta_t = \frac{\beta_r}{\beta_t \beta_r - (\beta_{tr})^2} \Delta_r = \frac{\beta_t}{\beta_t \beta_r - (\beta_{tr})^2}; \quad \Delta_{tr} = \frac{\beta_{tr}}{\beta_t \beta_r - (\beta_{tr})^2}; \quad \Delta_{tr} = \Delta_{rt}$$

- соответствующие коэффициенты подвижности жидкости. Из (28) следует, что перекрестные взаимодействия степеней свободы уменьшают значения осовных потоков переноса массы обусловленных поступательными или вращательными движениями молекул. При пренебрежение перекрестных взаимодействиями ($\beta_{tr} = 0$), перенос массы поступательными и вращательными степенями свободы молекул коэффициентами подвижностей $\Delta_t = \frac{1}{\beta_t}$ и $\Delta_r = \frac{1}{\beta_r}$ происходят независимо. Умножая коэффициенты подвижностей на $k_B T$ получим известные выражения для коэффициентов трансляционной и вращательной диффузии ($D_t = \frac{k_B T}{\beta_t}$ и $D_r = \frac{k_B T}{\beta_r}$). Аналогичные примеры приведены и по вязкоупругим параметрам жидкости.

В четвертой главе упрощённые с учетом структуры жидкостей, где обмен энергией между одинаковыми степенями свободы происходит быстрее чем обмен энергией между разными степенями свободы (где, $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$), использована для исследования процессов переноса массы и импульса в простых одноатомных жидкостях. В первом параграфе изложена общая схема определения обобщённых коэффициентов переноса (обобщённых модулей

упругости) жидкостей. Во втором параграфе упрощённые уравнения обобщённой гидродинамики, где определяющую роль играют трансляционные релаксационные процессы

$$J_t^\alpha(\nu) = \frac{\tau_t}{(1+i\nu\tau_t)} A_t^\alpha(\nu); \quad \sigma_t^{\alpha\beta}(\nu) = \frac{\tau_{tt}}{(1+i\nu\tau_{tt})} A_t^{\alpha\beta}(\nu); \quad (29)$$

использованы для описания динамических процессов переноса массы и импульса в простых жидкостях, состоящих из упругих сферических молекул.

В третьем параграфе с учетом выражения (20), (21) из (29) определены соответствующие динамические коэффициенты переноса массы и соответствующие им динамические модули упругости одноатомных жидкостей

$$\Delta_t(\nu) = \frac{\tau_t M_t^\Delta}{(1+(\nu\tau_t)^2)}, \quad D_t(\nu) = \frac{\tau_t M_t^D}{(1+(\nu\tau_t)^2)}, \quad D_t^T(\nu) = \frac{\tau_t M_t^{TD}}{(1+(\nu\tau_t)^2)_n} \quad (30)$$

$$M_t^\Delta(\nu) = \frac{M_t^\Delta (\nu\tau_t)^2}{(1+(\nu\tau_t)^2)}, \quad M_t^D(\nu) = \frac{M_t^D (\nu\tau_t)^2}{(1+(\nu\tau_t)^2)}, \quad M_t^{TD}(\nu) = \frac{M_t^{TD} (\nu\tau_t)^2}{(1+(\nu\tau_t)^2)}, \quad (31)$$

Все входящие в эти выражения параметры известные (см. (21)) и для проведения численных расчётов, приведены к безразмерной форме

$$\beta_t = B_3 \frac{\tilde{n}}{\tilde{T}} \int_0^\infty \left(\frac{\partial \tilde{\Phi}(r)}{\partial r} \right)^2 g_0(r) r^2 dr, \quad B_3 = 4 \frac{\epsilon \tau}{\sigma^2}. \quad (32)$$

$$P_t(T, n) = B_0 \tilde{n} \tilde{T} \left(1 - 4 \frac{\tilde{n}}{\tilde{T}} \int_0^\infty \frac{\partial \tilde{\Phi}(r)}{\partial r} g_0(r) r^3 dr \right), \quad B_0 = \frac{6\epsilon}{\pi \sigma^3}; \quad (33)$$

$$\left(\frac{\partial P_t(T, n)}{\partial n} \right)_T = B_1 \left(\tilde{T} - \frac{4\tilde{n}}{3} \int \frac{\partial \tilde{\Phi}(r)}{\partial r} g_0(r) r^3 dr \right), \quad B_1 = \epsilon \quad (34a)$$

$$\left(\frac{\partial P_t(T, n)}{\partial T} \right)_n = B_2 \left(\tilde{n} - \frac{2}{3} \left(\frac{\tilde{n}}{\tilde{T}} \right)^2 \int \frac{\partial (\tilde{\Phi}(r))^2}{\partial r} g_0(r) r^3 dr \right), \quad B_2 = \frac{6k_B}{\pi \sigma^3}. \quad (34b)$$

Для определения $\tilde{\Phi}(r)$ и $g_0(r)$ использованы выражения из [31-А]

$$\tilde{\Phi}(r) = \begin{cases} \infty, & \text{если } r \leq 1; \\ \left(\frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^6} \right), & \text{если } 1 < r < \infty. \end{cases} \quad (35)$$

$$g_0(r) = \begin{cases} \frac{2-\tilde{\rho}}{2(1-\tilde{\rho})^3}, & r \leq 1 \\ e^{-\frac{\tilde{\Phi}(r)}{\tilde{T}}} y(r) & 1 \leq r \leq 2 \\ e^{-\frac{\tilde{\Phi}(r)}{\tilde{T}}} & r > 2, \end{cases} \quad (36)$$

где $y(r)$ - бинарная функция распределения двух полостей, явный вид, которые на расстояниях $1 < r < 2$ приведены в [31-А].

В четвёртом параграфе используя значения молекулярных параметров жидкого аргона: $m = 66.341 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$, $\sigma = 3.405 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $\epsilon = 6,612 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$, проведены численные расчёты динамических параметров переноса массы.

В таблице 1 приведены результаты численного расчёта, зависимости коэффициента внутреннего трения жидкого аргона β_t от температуры и плотности по формуле (32). Увеличение значения $\beta_t(\rho)$ с ростом плотности и уменьшение $\beta_t(T)$ с ростом температуры, соответствуют установленным для этих параметров закономерностям. Более слабая зависимость $\beta_t(T)$ при фиксированных значениях плотности (значение по столбцам), чем значения $\beta_t(T)$, при экспериментально согласованных значений плотности и температуры (ЭСЗ) (диагональные значения таблицы) говорят об определяющей роли молекулярных взаимодействий в формировании характера зависимости параметров переноса жидкостей от температуры (механизм Бачинского). С

учёт $\tau_t = \frac{m}{\beta_t}$ на рис.1 приведены вычисленные на основе таблицы 1 графические результаты $\tau_t(T)$, при трёх значениях плотности [13-А].

Таблица 1. Результаты численного расчёта зависимости коэффициента внутреннего трения жидкого аргона ($\beta_t \cdot 10^{13}, \frac{\text{кг}}{\text{с}}$) от температуры и плотности

T, K	Плотность $\rho, \text{кг/м}^3$								Эксперимент
	1402	1377	1312	1240	1160	1065	1031	968	
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	5.0100
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	3.130
130	4,7941	4,5972	4,1276	3,6695	3,2239	2,7654	2,6170	2,3611	2,940
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	

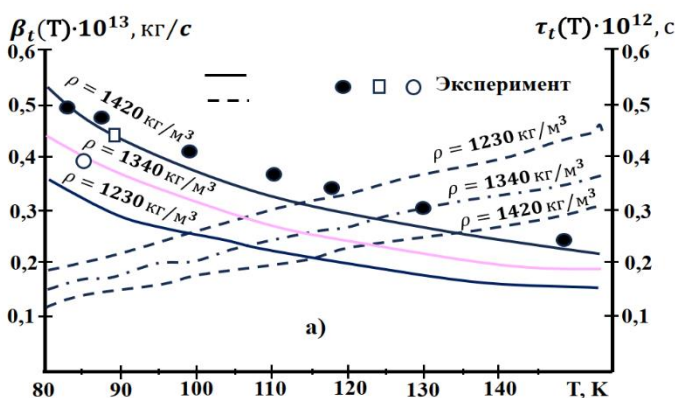


Рис.1 Зависимость коэффициента внутреннего трения β_t - сплошные линии и время трансляционной релаксации τ_t - пунктирные кривые от температуры для жидкого аргона: при трёх значениях плотности;

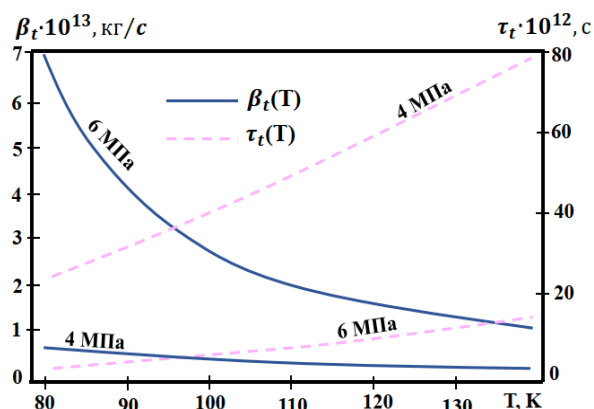


Рис. 2 Температурная зависимость коэффициента внутреннего трения (β_t) и времени трансляционной релаксации (τ_{tt}) для жидкого аргона, при давлениях: $40 \cdot 10^5 \text{ Па}$ и $60,5 \cdot 10^5 \text{ Па}$.

Для проверки обоснованности предположения об определяющей роли взаимодействия молекул в формировании характера температурной зависимости параметров переноса (механизма Бачинского) в выражениях для β_t и τ_t от переменных (T, ρ) переходили к переменным (T, P) . Тогда, как видно из рис.2, результаты численного расчёта $\beta_t(T)$ и $\tau_t(T)$ при двух значениях давления, показывают регулярную температурную зависимость по всему диапазону изменения температуры.

Из приведённых результатов следует, что полученные нами аналитические выражения для β_t и τ_t правильно отражают характер динамических параметров переноса и хорошо реагируют на изменения условия переноса, особенно в областях высоких давлений и низких температур. Соответствие теоретических результатов между собой и с экспериментальными

данными, дают основание говорить о правильности и физической обоснованности исходных моделей и аналитических выражений.

Используя, теперь, значения $\beta_t(T)$ и $\tau_t(T)$ можно провести численные расчёты закономерностей зависимости параметров переноса массы и импульса в простых одноатомных жидкостях от температуры и плотности.

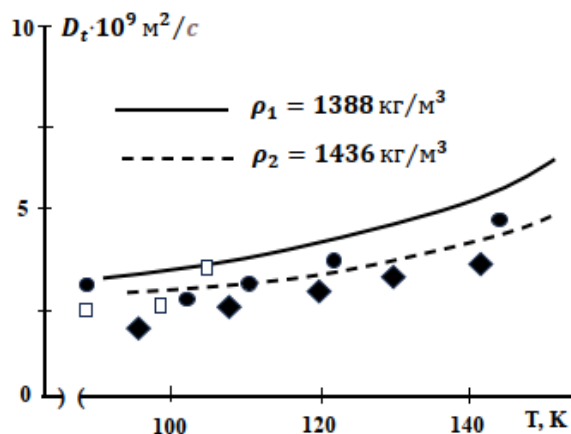


Рис.3. Результаты численного расчёта зависимости коэффициента диффузии жидкого аргона от температуры при двух значениях плотности.

На рис.3 приведены результаты численного расчёта зависимости низкочастотного значения коэффициента диффузии от температуры, для двух значений плотности по выражению $D_t = \tau_t M_t^D = \frac{1}{\beta_t} \left(\frac{\partial p_t}{\partial n} \right)_T$ с учётом (34). Здесь •, ♦, □ - экспериментальные результаты. На рис. 3 заметно более качественное соответствие экспериментальных и теоретических результатов, при больших плотностях. Идентичность характера температурной зависимости коэффициентов переноса и модулей упругости в приведённых на рис.4 результатах, указывают на

определяющую роль структуры жидкости в формировании характера зависимости коэффициентов переноса от термодинамических параметров состояния.

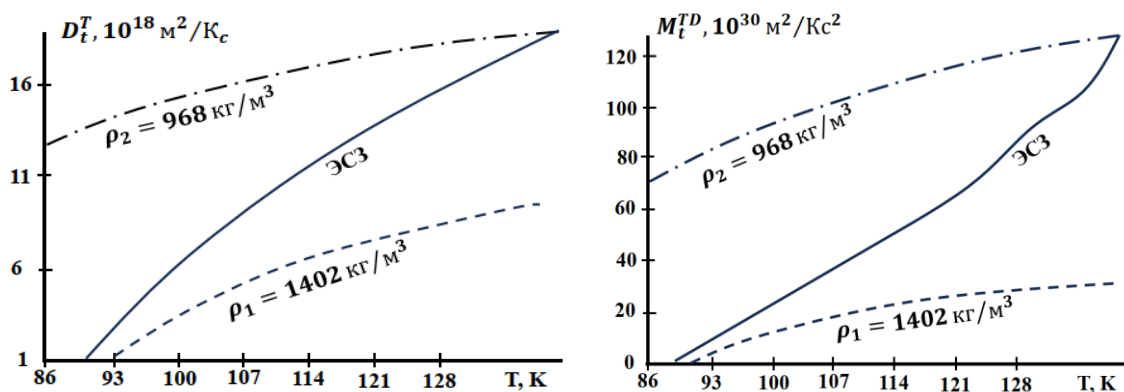


Рис. 4. Зависимость низкочастотных значений коэффициента термической диффузии (D_t^T) и высокочастотных значений модуля термодиффузионной упругости (M_t^{TD}) жидкого аргона от температуры при двух значениях плотности и ЭСЗ.

Идентичность характера температурной зависимости коэффициентов переноса и модулей упругости в приведённых на рис.4 результатах, указывают на определяющую роль структуры жидкости в формировании характера зависимости коэффициентов переноса от термодинамических параметров состояния.

В четвёртом параграфе, разделяя реальные и мнимые части второго уравнения (29), с учётом (20), для динамических коэффициентов сдвиговой

$\eta_s(\nu)$, объёмной $\eta_V(\nu)$ вязкостей и для соответствующих им динамических модулей упругости $\mu_s(\nu)$ и $\mu_V(\nu)$, получили выражения:

$$\eta_{s\,tt} = \frac{\mu_{s\,tt}(\infty)\tau_{tt}}{1+(\nu\tau_{tt})^2}; \quad \eta_{V\,tt} = \frac{\mu_{V\,tt}(\infty)\tau_{tt}}{1+(\nu\tau_{tt})^2}; \quad \mu_{s\,tt} = \frac{\mu_{s\,tt}(\infty)(\nu\tau_{tt})^2}{1+(\nu\tau_{tt})^2}; \quad \mu_{V\,tt} = \frac{\mu_{V\,tt}(\infty)(\nu\tau_{tt})^2}{1+(\nu\tau_{tt})^2}, \quad (37)$$

Значения всех входящих в (37) параметров, для жидкого аргона определены в предыдущем параграфе. Результаты численного расчёта зависимости низкочастотных значений сдвиговой вязкости жидкого аргона от температуры и плотности приведены в таблице 2. На таблице заметно хорошие согласия численных результатов при ЭСЗ с экспериментальными данными.

Таблица 2. Численный расчёт зависимости низкочастотных значений сдвиговой вязкости жидкого аргона от температуры и плотности

ρ , Т, К	1402 кг/м ³	1377 кг/м ³	1312 кг/м ³	1240 кг/м ³	1160 кг/м ³	1065 кг/м ³	1031 кг/м ³	968 кг/м ³	Эксп.
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	0,245
100	0,2347	0,2231	0,1948	0,1661	0,1375	0,1079	0,0983	0,0821	0,199
110	0,2136	0,2038	0,1794	0,1545	0,1294	0,1030	0,0944	0,0797	0,155
120	0,1962	0,1877	0,1664	0,1445	0,1222	0,0985	0,0908	0,0774	0,123
130	0,1816	0,1741	0,1554	0,1359	0,1159	0,0945	0,0874	0,0752	0,092
135	0,1752	0,1681	0,1504	0,1320	0,1130	0,0926	0,0859	0,0742	0,079
140	0,1692	0,1626	0,1459	0,1284	0,1103	0,0908	0,0844	0,0731	0,073

Почти аналогичные свойства у объёмной вязкости (см. рис.5). Изохорные значения $\eta_{V\,tt}(T)$ при низких плотностях, уменьшаются незначительно, и при высоких температурах, как для вязкости газов проявляют тенденцию к увеличению. Это ещё раз указывает на обоснованность предположения о превалировании газового механизма при высоких температурах, в случаях фиксированных значениях плотности.

Адхамовым А.А. было показано, что при фиксированных плотностях с ростом температуры вклады теплового движения молекул усиливаются, вязкость простых жидкостей при постоянном объёме ведёт себя, как

вязкость плотных газов и с увеличением температуры растёт по закону $\sqrt{T}$.

В пятом параграфе главы, исходя из выражения (30), (31) и (37), анализируется асимптотическое поведение динамических вязкоупругих параметров жидкого аргона, при предельно низкочастотных и предельно высокочастотных процессах.

Показано, что при низкочастотных динамических процессах (когда $\nu \rightarrow 0$) значения динамических модулей упругости стремятся к нулю и переносные

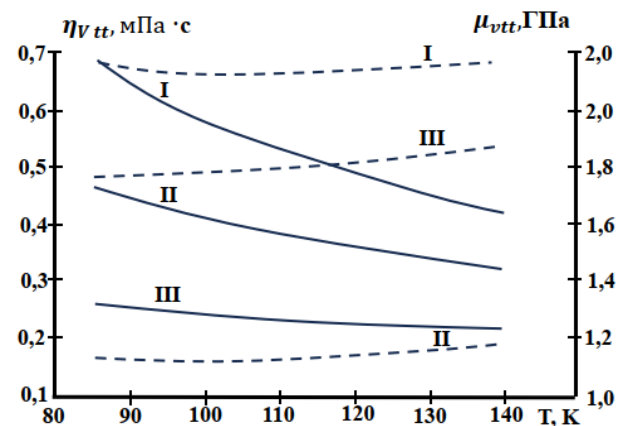


Рис.5. Температурные зависимости объёмной вязкости (сплошные линии) и модуля объёмной упругости (пунктирные линии) для жидкого аргона при плотностях: I - 1402 кг/м³; II - 1240 кг/м³; III - 1031 кг/м³.

свойства жидкостей описываются низкочастотными значениями коэффициентов переноса. Механизм переноса при этом являются диффузионными, а уравнения переноса дифференциальными уравнениями второго порядка параболического типа. При высокочастотных динамических процессах (когда $\nu \rightarrow \infty$) значения динамических коэффициентов переноса стремятся к нулю, и динамические процессы переноса в жидкостях описываются высокочастотными значениями модулей упругости. Механизмы переноса становятся волновыми, и уравнения переноса дифференциальными уравнениями второго порядка гиперболического типа.

В пятой главе рассматриваются жидкие системы, где обмен энергией между различными степенями свободы происходит быстрее, чем обмен энергией между одинаковыми степенями свободы. Математически это выражается условием

$$\frac{\tau_t}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \gg 1. \quad (38)$$

В первом параграфе главы, упрощённые с учётом этого условия уравнения обобщённой гидродинамики для потоков J_t^α и J_r^α использованы для описания динамического процесса переноса массы в неполярных жидкостях. Выявлено, что динамические свойства параметров переноса многоатомных жидкостей в основном определяются вкладом перекрёстных релаксационных процессов с характерным временем релаксации τ_{tr} , но при этом трансляционные и вращательные релаксационные процессы с характерными временами τ_t и τ_r , также вносят свой вклад.

Определены аналитические выражения для динамических коэффициентов подвижности, диффузии, термодиффузии, конвекции многоатомных жидкостей и для соответствующих им динамических модулей упругости. В частности, для динамического коэффициента диффузии и для соответствующего им динамического модуля диффузионной упругости получены выражения

$$D_{tr}(\nu) = \frac{D_{tr}}{1 + (\nu\tau_{tr})^2}; \quad M_{tt}(\nu) = \frac{(\nu\tau_{tr})^2}{1 + (\nu\tau_{tr})^2} \frac{D_{tr}}{\tau_{tr}}. \quad D_{tr} = \frac{1}{\beta_{tr}} \left(\frac{\partial P(\vec{x}, \vec{\theta}, t)}{\partial n} \right)_T \quad (39)$$

Во втором параграфе, входящие в (39) параметры приведены в удобное для проведения численных расчётов безразмерной форме. В частности,

$$\beta_{tr} = B_{tr} \frac{4\varepsilon\tau}{\sigma} \frac{\tilde{n}}{\tilde{T}} \int_0^\infty \left(\frac{\partial \tilde{\Phi}(r, \theta)}{\partial r} \right) \left(\hat{a} \frac{\partial \tilde{\Phi}(r, \theta)}{\partial \theta} \right) g_0(r, \theta) r^2 dr d\vec{\theta}, \quad B_{tr} = \frac{4\varepsilon\tau}{\sigma}, \quad \tau_{tr} = \frac{\sqrt{Im}}{\beta_{tr}}, \quad (40)$$

и для $\left(\frac{\partial P(\vec{x}, \vec{\theta}, t)}{\partial n} \right)_T$ используется выражение (34а) с зависящим от углов потенциалом межмолекулярного взаимодействия. В качестве потенциала межмолекулярного взаимодействия для неполярных многоатомных жидкостей использован потенциал Адхамова – Часовских

$$\tilde{\Phi}(r, \theta) = \begin{cases} \infty, & \text{если } r \leq 1; \\ 4\varepsilon(\theta_{kl}) \left[\left(\frac{\sigma(\theta_{kl}, \theta_{kr}, \theta_{lr})}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma(\theta_{kl}, \theta_{kr}, \theta_{lr})}{r} \right)^6 \right], & \text{если } 1 < r < \infty. \end{cases} \quad (41)$$

а для полярных жидкостей потенциал Штокмайера

$$\tilde{\Phi}(r, \theta) = \frac{\Phi_{ij}}{4\varepsilon} = [(r)^{-12} - (r)^{-6}] - \chi f(\theta_i, \theta_j, \Delta\varphi) r^{-3}, \quad (42)$$

В таблице 3, приведены результаты численного расчёта температурной зависимости характерных времён релаксации (τ_t, τ_{tr}) жидкого азота при ЭСЗ. Из таблицы видно, что более близкие к экспериментальным результатам

являются значения τ_{tr} . В диссертации приведены результаты численных расчётов зависимости коэффициентов внутреннего трения (β_t, β_{tr}), подвижности (Δ_t, Δ_{tr}), диффузии ($D_t, D_{tr}, D_t^T, D_{tr}^T$), характер от температуры и плотности. характер зависимости, от температуры и плотности почти такой же, как в случае простых жидкостей.

Таблица 3 Результаты численного расчёта зависимостей характерных времён релаксации жидкого азота при согласованных значениях температуры и плотности по формулам (45).

$T(K)$	ρ кг/м ³	$\tau_t \cdot 10^{12} \text{ с}$	$\tau_{tr} \cdot 10^{12},$ с	Эксп.
68	848	1,05717	2,1196	
70	839	1,13296	2,2672	
80	774	1,66092	3,2965	3,02
90	744	2,05585	4,0492	2,64
100	688	2,74874	5,3770	2,93
110	623	3,74124	7,2744	3,88
115	581	4,51008	8,7451	7,53
120	527	5,9636	11,016	12,4

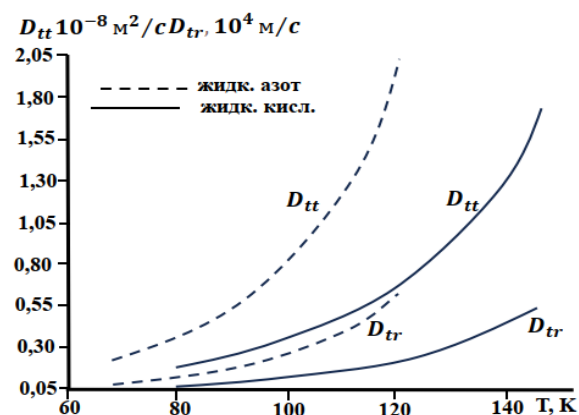


Рис. 6. Зависимость коэффициентов диффузии жидкого азота (пунктирные кривые) и жидкого кислорода (сплошные кривые) от температуры.

В качестве примера, на рис. 6 отражены результаты численного расчета зависимости коэффициентов диффузии жидкого азота и кислорода при ЭСЗ. Согласно рис.6 характер температурной зависимости коэффициента диффузии от температуры, одинаковы для разных степеней свободы и разных жидкостей.

По аналогичной схеме, с учетом условие $\tau_r \ll \tau_t$ и использованием потенциала Штокмайера (43) проведены численные расчеты зависимости динамических параметров переноса массы полярных многоатомных жидкостей (жидкого аммиака и воды) от температуры и плотности.

В таблице 4, приведены результаты численного расчёта зависимостей коэффициентов диффузии воды от температуры при ЭСЗ. Здесь, необходимо обратить внимание на следующее. Согласно условию (38) для многоатомных жидкостей определяющим является перекрёстные эффекты, а в таблице 4. экспериментальные результаты по порядку значений и размерности близки к трансляционным коэффициентам диффузии. Видимо, независимо от

Таблица 4. Зависимость коэффициентов диффузии воды от температуры, при ЭСЗ					
Темп. Т, К	$D_t, 10^{-9} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$	$D_r, 10^{12} \frac{1}{\text{с}}$	$D_{tr}, 10^2 \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$	Т, К	$D, 10^{-9} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$
273	1,0901	1,3635	0,1561	Эксперимент	
278	1,1246	1,3940	0,1594	278	1,43
288	1,2358	1,4590	0,1656	283	1,68
303	1,3054	1,5702	0,1732	288	1,97
323	1,4546	1,7277	0,1823	298	2,57
343	1,6409	1,9086	0,1889	308	3,48
353	1,7368	2,0080	0,1914	318	4,38
363	1,8403	2,1128	0,1934	328	5,45
373	1,9305	2,2254	0,1949		

используемых условий вклад трансляционных степеней свободы в физическом переносе массы, как минимум для жидкостей с не очень сложными формами молекул, является определяющим.

В третьем и четвёртом параграфах этой главы рассмотрены динамические вязкоупругие свойства многоатомных жидкостей. В

частности, на основе решения системы уравнения (19), (20) с учётом условия (38), для динамического коэффициента сдвиговой вязкости и для соответствующего им сдвигового модуля упругости многоатомных жидкостей получены выражения

$$\eta_{s\ tr}(\nu) = \frac{\mu_{s\ tr} a \tau_{tr}}{2(1+(\nu\tau_{эф})^2)(1+(\nu\tau_{tr})^2)}; \mu_{s\ tr}(\nu) = \frac{\mu_{s\ tr} a \nu^2 \tau_{tr} \tau_{эф}}{2(1+(\nu\tau_{эф})^2)(1+(\nu\tau_{tr})^2)}, \quad (43)$$

где $\tau_{эф} = \frac{10\tau_{tr}^2(\tau_{tt}+\tau_{rr})}{3\tau_{tt}\tau_{rr}}$, $\mu_{tr} = \mu_t + \mu_r$, $a = \sqrt{\frac{l}{m}}$. Из выражения (43) видно, что в определении динамических вязкоупругих свойств многоатомных жидкостей основной вклад вносят перекрёстные релаксационные процессы (τ_{tr}), а вклады трансляционных (τ_{tt}) и вращательных (τ_{rr}) релаксации учитываются через $\tau_{эф}$ в виде комбинации $\frac{\tau_{tt}\tau_{rr}}{\tau_{tt} + \tau_{rr}}$.

Результаты численного расчёта низкочастотных значений сдвиговой вязкости

($\eta_{s\ tr}(0) = \mu_{s\ tr} a \tau_{tr}$) жидкого азота от температуры и плотности отражены в таблице 5. Заметно, хорошие согласия теоретических расчётных результатов с экспериментальными данными в областях низких температур и больших

Таблица 5 Зависимость сдвиговой вязкости жидкого азота ($\eta_{s\ tr}$, мПа. с) от температуры и плотности

Темп. Т, К	Плотность кг/м ³									Эксп.	Расч. [15-А]
	848	839	774	744	688	623	581	527			
68,08	0,2218	0,2126	0,1557	0,1344	0,1014	0,0719	0,0569	0,0412	0,2210	0,1251	
70,23	0,2173	0,2082	0,1527	0,1319	0,0997	0,0709	0,0562	0,0408	0,2000	0,1245	
80,00	0,2007	0,1925	0,1420	0,1231	0,0938	0,0675	0,0540	0,0398	0,1400	0,1240	
90,00	0,1887	0,1811	0,1345	0,1170	0,0898	0,0654	0,0528	0,0396	0,1010	0,0870	
100,00	0,1799	0,1728	0,1291	0,1128	0,0872	0,0642	0,0523	0,0398	0,0750	0,0620	
110,00	0,1732	0,1665	0,1253	0,1098	0,0855	0,0636	0,0523	0,0403	0,0560	0,0450	
115,00	0,1705	0,1640	0,1237	0,1086	0,0849	0,0635	0,0524	0,0406	0,0450	0,0370	
120,00	0,1681	0,1617	0,1224	0,1076	0,0845	0,0635	0,0526	0,0410	0,0370	0,0290	

плотностей. Иллюстративно, эти свойства хорошо заметны и на рис. 7, где приведены результаты численного расчёта значений $\eta_{s\ tr}(T)$, при ЭСЗ.

Аналогичные результаты получены и для коэффициента объёмной вязкости и соответствующего им модуля объёмной упругости жидкого азота, которые приведены в таблице 6. Как видно, изобарные (диагональные) значения $\eta_{v\ tr}(T)$ по всему диапазону изменения температуры с ростом температуры монотонно уменьшаются, а изохорные значения $\eta_{v\ tr}(T)$ (по столбцам), особенно при низких плотностях (527 кг/м³), сначала уменьшаются с ростом температуры и затем с температуры 90К начинают увеличиваться, что соответствует экспериментальным данным.

Из сопоставления приведённой информации по вязкоупругим свойствам многоатомных жидкостей можно заметить, что результаты кинетической теории простых жидкостей с потенциалом Леннарда-Джонса [15-А] лучше описывают свойства простых многоатомных жидкостей в областях высоких

температур и низких плотностей (ближе к газовой области). Полученные в этой главе,

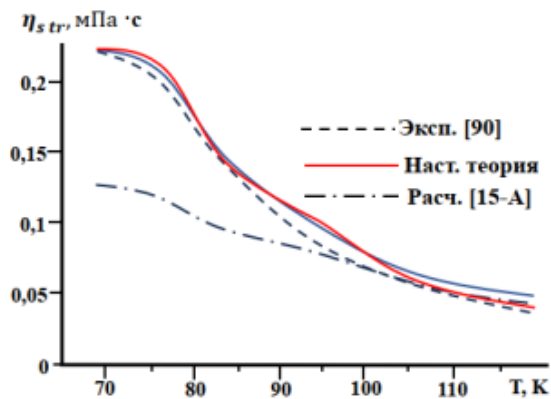


Рис. 7. Результаты численного расчёта зависимости сдвигового коэффициента вязкости жидкого азота от температуры.

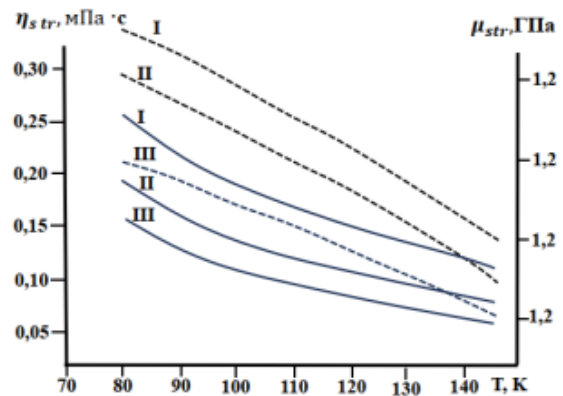


Рис. 8. Зависимость сдвиговой вязкости (сплошные) и сдвигового модуля упругости жидкого кислорода (пунктирные линии) при плотностях: I-1190кг/м³; II-974кг/м³; III- 741кг/м³.

Таблица 6. Зависимость объёмной вязкости жидкого азота ($\eta_{V_{tr}}$, мПа · с) от температуры и плотности

Темпер. T, К	Плотность, кг/м ³								Эксп.
	848	839	774	744	688	623	581	527	
68,08	0,1592	0,1525	0,1117	0,0964	0,0728	0,0516	0,0408	0,0295	-
70,23	0,1559	0,1494	0,1096	0,0947	0,0716	0,0509	0,0403	0,0293	-
80,00	0,1441	0,1382	0,1019	0,0884	0,0673	0,0484	0,0387	0,0286	0,0970
90,00	0,1354	0,1300	0,0965	0,0840	0,0645	0,0469	0,0379	0,0284	0,0860
100,00	0,1291	0,1240	0,0927	0,0809	0,0626	0,0461	0,0375	0,0286	0,0900
110,00	0,1243	0,1195	0,0899	0,0788	0,0614	0,0457	0,0375	0,0289	0,0990
115,00	0,1223	0,1177	0,0888	0,0779	0,0610	0,0456	0,0376	0,0292	0,1400
120,00	0,1206	0,1161	0,0879	0,0772	0,0606	0,0456	0,0377	0,0294	0,2030

упрощённые результаты (43), с использованием потенциала Адхамова – Часовских (41) (сплошная кривая на рис. 7) гораздо лучше описывают вязкоупругие свойства многоатомных жидкостей в областях низких температур и высоких плотностей (т.е. в жидкой области).

Приведённые на рис.8 результаты численного расчёта температурной зависимости сдвиговой вязкости и сдвигового модуля упругости жидкого кислорода для трёх значений плотности, показывают одинаковый характер температурной зависимости $\eta_{Stt}(T)$ и $\mu_{Stt}(T)$, что указывает на определяющей роли структуры в формировании характера зависимости динамических вязкоупругих параметров жидкости от изменения термодинамических параметров состояния. Кроме того, на этом рисунке заметен вклад релаксационных процессов в определение динамических вязкоупругих свойств жидкостей. Вклад релаксационных процессов изменяет качество кривых температурной зависимости вязкоупругих параметров жидкости - выпуклых

кривых $\mu_{stt}(T)$, превращают во вогнутые кривые $\eta_{str}(T)$ (с учётом выражения $\eta_{stt} = \mu_{stt} \tau_{tr}$).

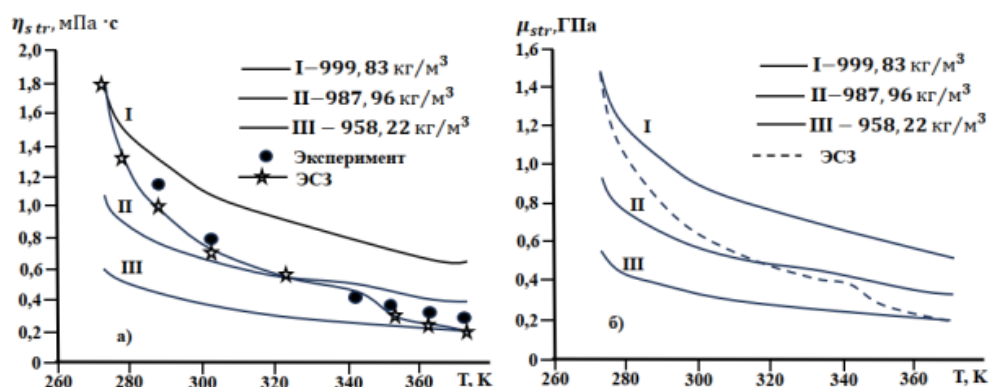


Рис.9. Результаты численного расчёта зависимости коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_{str}(T)$ - (рис.9а) и модуля сдвиговой упругости $\mu_{str}(T)$ -- (рис. 9б) от температуры для воды при трёх значениях плотности и ЭСЗ.

Результаты исследования динамических вязкоупругих свойств полярных

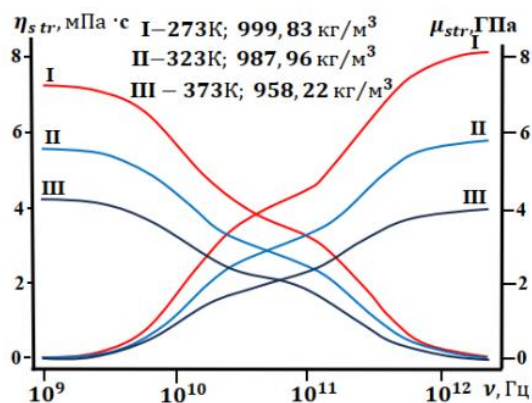


Рис. 10. Результаты численного расчёта зависимости динамического коэффициента сдвиговой вязкости ($\eta_{str}(\nu)$) и динамического модуля сдвиговой упругости ($\mu_{str}(\nu)$) воды при трёх согласованных значениях температуры и плотности.

многоатомных жидкостей с использованием потенциала Штокмайера (42), качественно такие же как результаты для неполярных жидкостей. Например, представленный на рис. 9, характер зависимости стационарных значений коэффициента сдвиговой вязкости и сдвигового модуля упругости воды, при трёх значениях плотности и ЭСЗ такие же, как у. неполярных жидкостей.

Согласно выражениям (43), частотная дисперсия динамических вязкоупругих параметров многоатомных жидкостей, как минимум имеет две релаксационные области с характерными временами релаксации $\tau_{эф}$ и τ_{tr} . На рис.

10 приведены результаты численного расчёта зависимости динамического коэффициента сдвиговой вязкости, а также соответствующего ему динамического модуля сдвиговой упругости от частоты, где чётко видны две разнесённые примерно на 100 Гц релаксационные области.

В шестой главе приведены результаты термодинамического и молекулярно-статистического описания равновесных и динамических свойств теплофизических параметров нематических жидких кристаллах (НЖК), с учётом вклада дальнего ориентационного порядка в них.

В первом параграфе главы, на основе разложение Ландау-Де Жена для термодинамического потенциала Гиббса по тензорному параметру порядка сформулировано выражение для термодинамического потенциала, позволяющего исследовать аномальные ориентационные свойства

теплофизических и упругих параметров НЖК в окрестности точки фазового перехода НЖК-ИЖ.

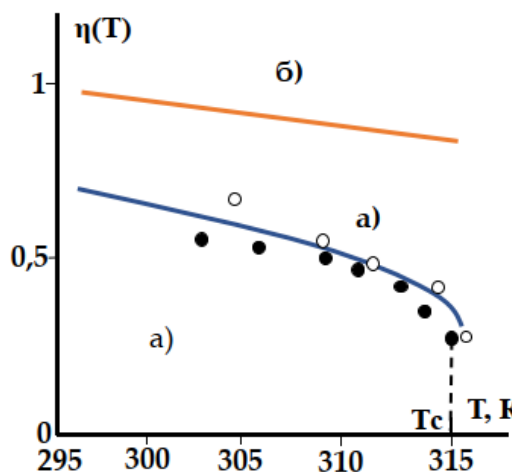


Рис. 11. Зависимость ориентационного параметра порядка от температуры для МББА. при двух значениях давлении: а) $P = P_c$; б) $P - P_c = 10^7$ Па

Во втором параграфе главы определено аналитическое выражение для ориентационного параметра порядка,

$$\eta(P, T) = \frac{3}{4} \eta_c \left(1 \pm \frac{\sqrt{T_i - T + \beta(P_c - P)}}{3\sqrt{T_i - T_c}} \right), \eta = 0, \quad (44)$$

где T_c , P_c , η_c – критические значения температуры, давления, ориентационного параметра порядка, T_i – температура выше которого нематическая фаза абсолютно неустойчива, β – постоянный параметр. Результаты численного расчёта зависимости η от температуры и давления для МББА по формуле (44) приведена на рис. 11. Из рис. 11 видно, что с повышением давления аномальные свойства $\eta(P, T)$ снимаются, просто критическая температура смещается в

область более высоких температур.

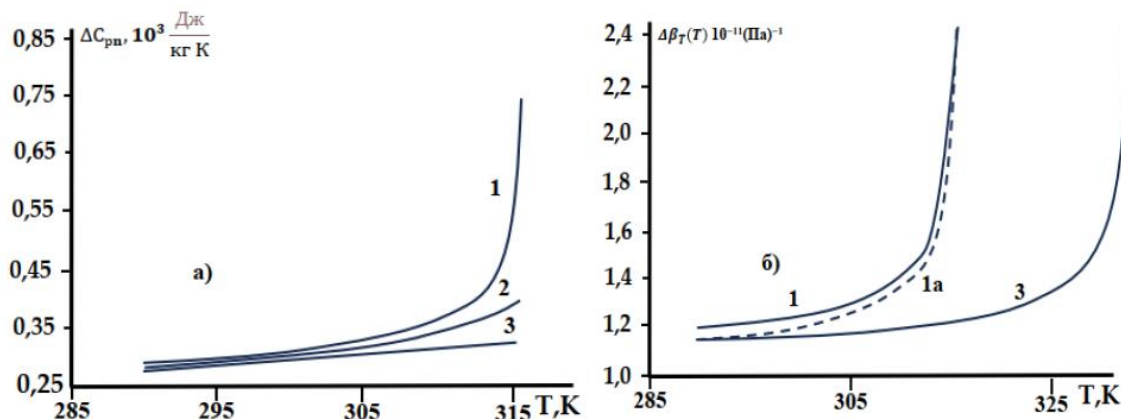


Рис. 12. Зависимость аномальные части теплоёмкости ΔC_{pn} и сжимаемости $\Delta \beta_T$ от температуры для МББА, при: 1) $P = P_c$; 2) $P - P_c = 10^7$ Па, 3) $P - P_c = 5 \cdot 10^7$ Па.

Получены аналитические выражения для ориентационных аномальных частей теплоёмкости и сжимаемости НЖК, и соотношение Эренфеста для них

$$\Delta C_{pn}(\eta) = \frac{27}{64} \frac{\alpha \eta_c^2 T}{(T_i - T_n)} \left(1 + \frac{\sqrt{T_i - T_n}}{\sqrt{T_i - T + \beta(P - P_c)}} \right), \beta_T = -\frac{27}{64} \frac{\alpha \beta^2 \eta_c^2}{(T_i - T_n)} \left(1 + \frac{\sqrt{T_i - T_n}}{\sqrt{T_i - T + \beta(P - P_c)}} \right), |\Delta \beta_T| = \beta^2 \frac{\Delta C_p}{T}. \quad (45)$$

На рис. 12. представлены зависимости ориентационных аномальных частей теплоёмкости и сжимаемости от температуры и давления по (45). Из этих рисунков, также видно, что с повышением давления аномальная область $\Delta C_{pn}(T)$ и $\Delta \beta_T(T)$ смещаются в сторону высоких температур. Пунктирная кривая на рис. 12б построена по значениям $\Delta C_{pn}(T)$, согласно соотношению Эренфеста и обосновывает соответствия полученных нами выражения с соответствующими термодинамическими соотношениями.

В третьем параграфе рассмотрены вклады флуктуации ориентационного

порядка, которые становятся существенными вблизи точки фазовых переходов. Определены аналитические выражения для вкладов флуктуации ориентационного порядка в аномальные свойства теплоёмкости- ΔC_{Pn}^f и ΔC_{Pi}^f , которые приведены в диссертации. По суммарным значениям вкладов ориентации и флуктуации ориентационного порядка, определены аномальные части теплоёмкости НЖК в нематической и изотропной фазах

$$\begin{aligned}\Delta C_{Pn}(P, T) &= C_{Pn}(P, T) - C_{Pi}^R(P, T) = \Delta C_{Pn}(P, T, \eta) + \Delta C_{Pn}^f(P, T) \\ \Delta C_{Pi}(P, T) &= C_{Pi}(P, T) - C_{Pi}^R(P, T) = \Delta C_{Pi}^f(P, T).\end{aligned}\quad (46)$$

Результаты численного расчёта ориентационного аномального поведения теплоёмкости МББА в окрестности точки фазового перехода НЖК-ИЖ по

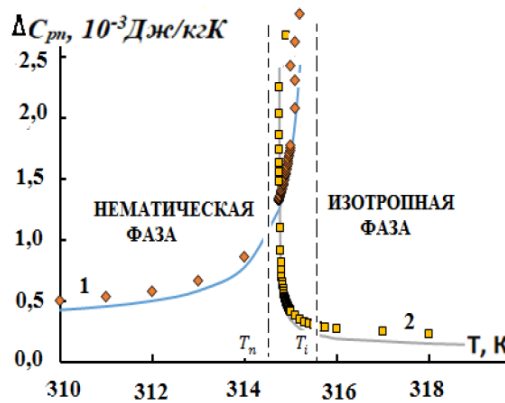


Рис. 13. Температурная зависимость теплоёмкости МББА в окрестностях точки фазового перехода НЖК-ИЖ

выражениям (46) представлены на рис. 13.

Прямая линия 3 и экспериментальные точки были взяты из литературных данных. Заметно, что соответствие теоретических и экспериментальных результатов хорошие. Из выражения (46) видно, что для описания закономерности зависимости теплоёмкости НЖК в целом от температуры и давления (плотность), необходимо знание зависимости регулярной части теплоёмкости НЖК $C_{Pi}^R(P, T)$ от этих параметров. Это задача в 5-ом параграфе главы, решается

использованием приведённых во второй главе молекулярно-статистической теории асимметричных жидкостей.

Для внутренней энергии НЖК с использованием потенциала Майера - Заупе $\tilde{\Phi}(\theta) = -\eta \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta_i - \frac{1}{2} \right)$ получено выражение

$$e(T, \rho) = \frac{12\epsilon}{\pi\sigma^2 L} \tilde{n} \tilde{T} + \frac{128\epsilon}{\sigma L^2} y(1) \tilde{n}^2 + \frac{32\epsilon}{\pi\sigma L^2} \tilde{n}^2 C(r) a(\theta) - \frac{32\epsilon}{\pi\sigma L^2} \tilde{n}^2 a(r) a(\theta) \eta^2, \quad (47)$$

Согласно этому выражению внутренняя энергия, как термодинамический потенциал в изотропной окрестности точки фазового перехода зависит от ориентационного параметра порядка (как η^2), что указывает на возможность существования ближнего ориентационного порядка (sort order) в изотропной фазе НЖК. Исходя из первого закона термодинамики, на основе выражения (47) и (33) с учётом потенциала Майера – Заупе для регулярной части теплоёмкости НЖК определено выражение

$$c_{Pi}^R(T, n) = c_{Pi}^k(T, n) + c_{Pi}^c(T, n) + c_{Pi}^r(T, n) + c_{Pi}^\theta(T, n) + c_{Pi}^{r\theta}(T, n), \quad (48)$$

где учтены вклады: теплового движения молекул- c_{Pi}^k ; упругих столкновений - c_{Pi}^c ; радиальной структуры и радиального взаимодействия - c_{Pi}^r ; ориентационной структуры и ориентационного взаимодействия - c_{Pi}^θ ; перекрёстного взаимодействия структур и степеней свободы - $c_{Pi}^{r\theta}$. В диссертации приведены молекулярные выражения всех этих компонент теплоёмкости.

На рис. 14 отражены результаты температурной зависимости компонент теплоёмкости изотропной фазы ПАА по формуле (48). Прямой линией 1

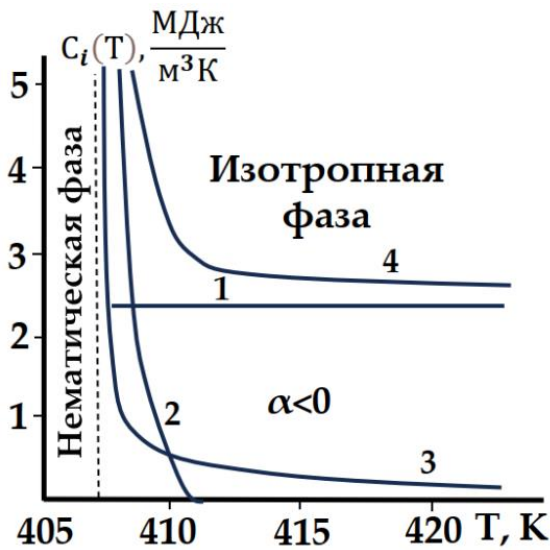


Рис.14. Результаты численного расчёта температурной зависимости компонент теплоёмкости ПАА в изотропной фазе.

отражена температурная зависимость радиальной части теплоёмкости изотропной фазы $C_{pi}(T, r) = c_{pi}^k + c_{pi}^c + c_{pi}^r(T)$, который проявляет слабую линейную зависимость от температуры. (см. прямая линия 3 на рис.13). Кривая 2 представляет температурную зависимость ориентационных компонент теплоёмкости изотропной фазы $C_{pi}(\theta) = c_{pi}^\theta(T) + c_{pi}^{r\theta}(T)$. Он проявляет резкий нелинейный характер, но в очень узкой ($\Delta T \approx 3K$) изотропной окрестности точки фазового перехода. Кривая 3 вклад рассмотренного нами в

предыдущем параграфе флуктуации ориентационного порядка. Кривая 4 это суммарные значения всех компонент теплоёмкости изотропной фазы. Такой, покомпонентный анализ теплоёмкости проведена впервые и результаты вполне соответствует экспериментальным данным.

В четвёртом и шестом параграфах термодинамическими и молекулярно-статистическими методами исследованы ориентационные упругие свойства НЖК. В четвёртом параграфе исходя из полученного для деформационной части термодинамического потенциала выражение, определены простые формулы для коэффициентов упругости ориентационных деформации НЖК в виде

$$K_1 = 10.08 \cdot 10^{-7} \eta^2, H; \quad K_2 = 7.66 \cdot 10^{-7} \eta^2, H; \quad K_3 = 22.77 \cdot 10^{-7} \eta^2, H. \quad (49)$$

Численные расчёты зависимости коэффициентов упругости ПАА от температуры и давления по формулам (49) приведены на рис. 15а. Согласие экспериментальных и расчётных результатов удовлетворительные.

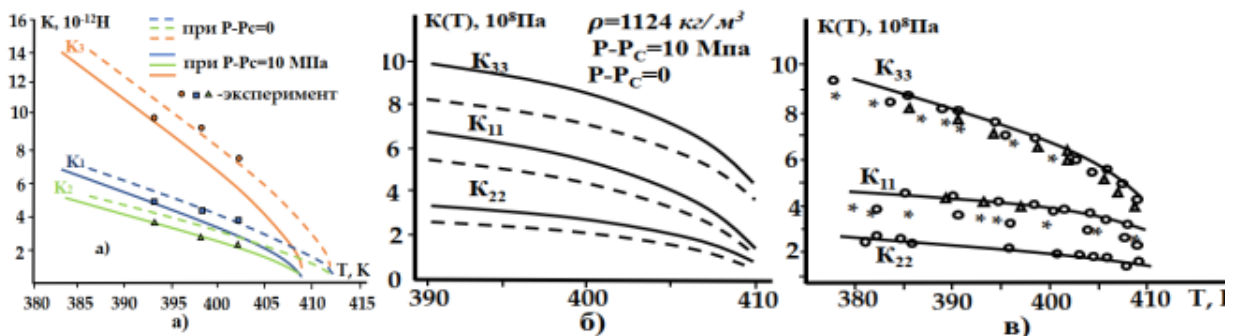


Рис. 15. Результаты численного расчёта зависимости ориентационных коэффициентов (K_1 , K_2 , K_3) и модулей упругости (K_{11} , K_{22} , K_{33}) ПАА от температуры: а) термодинамическим; б) молекулярно-статистическим методам; в) эксперимент.

В шестом параграфе главы показано, что входящие в выражение $A_r^{\alpha\beta}$ (20) модули упругости (21) могут описать ориентационные упругие свойства НЖК при деформациях типа поперечного сгиба K_{11} (splay), кручения K_{22} (torsion) и K_{33} продольного изгиба (bend). На рис. 15б приведены результаты численного расчёта зависимости ориентационных модулей упругости ПАА от температуры, плотности и давления на основе (21). На рис. 15в показана экспериментальные результаты. Из рис.15 явно видно хорошие соответствие расчётных результатов между собой и с экспериментальными данными.

В седьмом параграфе главы упрощённое с учётом условие $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$ выражение для потока числа частиц J_r^α , где определяющую роль играют, вращательные релаксационные процессы, применено для описания ориентационных параметров переноса массы в НЖК. Определены аналитические выражения и проведены численные расчёты значения характерного времени вращательной релаксации, без учёта и с учётом радиальной структуры НЖК с использованием потенциала Майера -Заупе

$$\tau_{rr} = \frac{10 I \tilde{T} \int_0^\pi e^{-\frac{\eta}{T}(\frac{3}{2} \cos^2 \theta_i - \frac{1}{2})} \sin \theta_i d\theta_i}{81 \tau \frac{A}{V_m^2} \eta^2 \int_0^\pi e^{-\frac{\eta}{T}(\frac{3}{2} \cos^2 \theta_i - \frac{1}{2})} \cos^2 \theta_i \sin^3 \theta_i d\theta_i}, \quad \tau_{rr} = \frac{I \tilde{T}}{324 \epsilon \tilde{\eta} \eta^2 \int_0^\pi \int_0^\infty \sin^3 \theta \cos^2 g_0(r, \theta) r^2 dr d\theta}. \quad (50)$$

Результаты численного расчёта зависимости τ_{rr} от температуры и

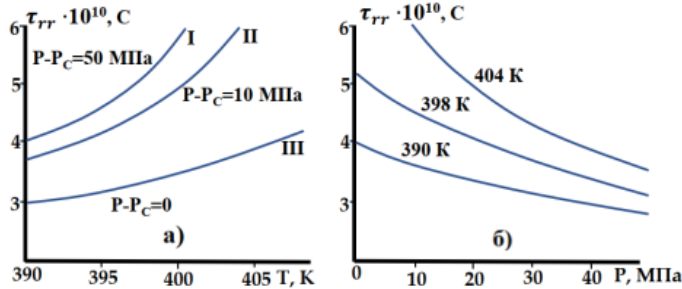


Рис.16. Зависимость характерного времени вращательной релаксации τ_{rr} от температуры при трёх значениях давления (а), и от давления при трёх значениях температуры (б), для ПАА

давления для ПАА по первым выражением (59), приведена на рис. 16. Из рисунка видно, что с ростом температуры значение $\tau_{rr}(T)$ увеличивается. Это говорить о термической природе τ_{rr} для НЖК. С увеличением давления $\tau_{rr}(P)$ уменьшается, что соответствует свойствам τ_{rr} для жидкостей.

Используя значения τ_{rr} вычислена зависимость коэффициентов вращательного внутреннего трения

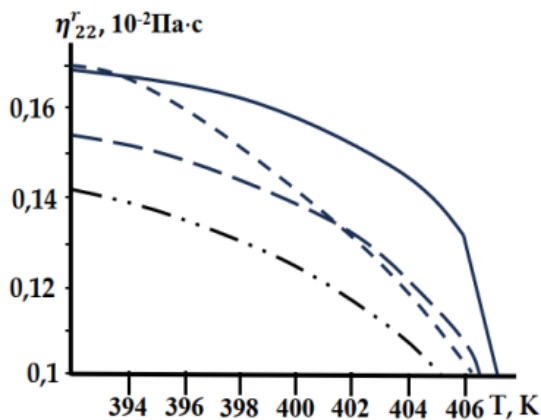


Рис. 17. Температурная зависимость коэффициента ориентационной вязкости ПАА для трёх значениях плотности: — 1158кг/м³; -- 1138кг/м³; - · - 1124 кг/м³ и ---- ЭСЗ.

Используя значения τ_{rr} $\beta_r = \frac{I}{\tau_r}$ ($\tau_r = \frac{3}{5} \tau_{rr}$), подвижности $\Delta_r = \frac{1}{\beta_r}$, диффузии $D_r = \frac{k_B T}{\beta_r}$, и других от температуры, плотности и давления.

В последнем, **восьмом параграфе** на основе второго выражения (29) описываются динамические ориентационные вязкоупругие свойства НЖК. Для низкочастотных значений ориентационных коэффициентов вязкости НЖК, получены выражения $\eta_{11} = \tau_{rr} K_{11}$, $\eta_{22} = \tau_{rr} K_{22}$, $\eta_{33} = \tau_{rr} K_{33}$, $\eta_V^r = \tau_{rr} K_V^r$. Используя вычисленные

значения K_{11}, K_{22}, K_{33} из шестого параграфа и значения τ_{rr} из седьмого, проведены численные расчёты зависимости ориентационных коэффициентов вязкости ПАА от температуры, давления и плотности. Результаты численного расчёта зависимости ориентационного коэффициента вязкости η_{22} от температуры, при трёх значениях плотности и ЭСЗ приведены на рис.17.

Идентичность характера температурной зависимости $\eta_{22}^r(T)$ и $K_{22}(T)$ на рис.15 и рис. 17, согласно выше приведённых рассуждений указывает на определяющую роль структуры НЖК в определении характера температурной зависимости параметров переноса в НЖК.

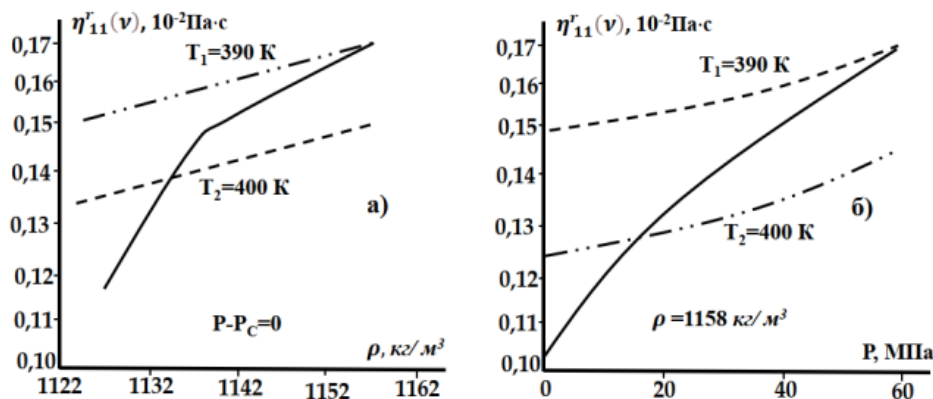


Рис.18. Результаты численного расчёта зависимости низкочастотных значений ориентационного динамического коэффициента вязкости ПАА от плотности (а) и от давления (б).

На рис. 18а,б приведены результаты численного расчёта зависимости коэффициента ориентационной вязкости ПАА от плотности (а) и от давления (б) при разных значениях температуры. Как видно, характер зависимости ориентационных параметров переноса НЖК от изменения термодинамических параметров состояния такие же, как у простых и многоатомных жидкостей.

Аналогичные закономерности установлены для коэффициента вращательной объёмной вязкости, и для соответствующего ему вращательного модуля объёмной упругости. Показано, что наши теоретические результаты лучше описывают явления переноса в НЖК при высоких плотностях.

На основе приведённых в 4-6 главах диссертации результатов, можно сказать, что упрощённые с учётом особенностей молекулярной структуры жидкостей уравнения обобщённой гидродинамики качественно, а в некоторых случаях и количественно описывают динамические процессы переноса в одноатомных и многоатомных жидкостях и нематических жидких кристаллах.

Более общие результаты, с учётом взаимных вкладов процессов переноса массы импульса, момента импульса и тепла, корреляции несовпадающих компонент потоков и других высоких приближений дают более корректные и достоверные результаты. Перспективными являются и численные решения сложных уравнений с использованием возможности современных компьютеров.

ВЫВОДЫ И РЕКОМЕНДАЦИИ

ВЫВОДЫ. 1. **Развита** молекулярно-статистическая теория явлений переноса и релаксации в сложных асимметричных жидких системах. **Предложена** более общая чем модель жидкостей, состоящих из упругих сферических молекул, модель сложных асимметричных жидкостей, состоящая из одинаковых жёстких молекул произвольной формы. [1-А,2-А,7-А,11-А,13-А,34-А,55-А]

2. Значительным увеличением числа динамических величин, характеризующих неравновесное состояние жидкой системы, и более корректным учётом угловых координат для описания положения несферических молекул в фазовом пространстве, **метод НФР обобщён** для описания динамических явлений переноса и релаксационных процессов в сложных асимметричных жидкостях. [1-А,2-А,10-А,11-А,37-А,46-А,55-А]

3. **Составлена** замкнутая и взаимно связанная система **уравнений временной эволюции** динамических величин, характеризующих неравновесное состояние жидких систем, которые составляют основу описания динамических процессов переноса и релаксационных явлений в рассматриваемой модели асимметричных жидкостей. Определены, термические и калорические уравнения состояния и другие необходимые для описания неравновесных свойств жидкой системы, **макроскопические параметры**. [2-А,10-А,11-А,13-А,34-А,45-А,77-А,]

4. **Сформулированы замкнутые системы уравнения обобщённой (релаксационной) гидродинамики**, позволяющие исследовать динамические процессы переноса массы, импульса и момента импульса в сложных асимметричных жидкостях с учётом вкладов особенностей их молекулярной структуры и механизмов, происходящих в них внутренних релаксационных процессов. [2-А,10-А,19-А,44-А,55-А,77-А,78-А,79-А]

5. Проведён детальный анализ молекулярных механизмов, происходящих в рассматриваемой жидкой системе внутренних релаксационных процессов. **Установлено**, что все содержащиеся в уравнениях обобщённой гидродинамики асимметричных жидкостей характерные времена релаксации выражаются через три основных характерных времени – трансляционной (τ_t), вращательной (τ_r) и прекрестной (интерференционной) релаксации (τ_{tr}). [19-А,23-А,10-А,11-А,13-А,34-А,77-А]

6. Исследована до кинетических молекулярных процессов. **Выявлено**, что на промежутках между столкновениями на несферические молекулы со стороны соседних молекул действуют случайные силы $F(t)$ и случайные моменты сил $N(t)$, делают их поступательное и вращательное движение диссипативными. Эти диссипации и обеспечивают необратимость неравновесных процессов, которые в уравнениях обобщённой гидродинамики учитываются через характерные времена релаксации выражениями равновесных корреляторов $\langle F(0)F(t) \rangle_0$, $\langle N(0)N(t) \rangle_0$ и $\langle F(0)N(t) \rangle_0$. [12-А,19-А,63-А,74-А,76-А,77-А]

7. **Упрощённые** с учётом условия $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$ уравнения обобщённой

гидродинамики, где определяющую роль играют трансляционные релаксационные процессы, использованы для исследования динамических процессов переноса массы и импульса в простых одноатомных жидкостях. (жидкого аргона). Определены аналитические выражения и проведены численные расчёты зависимости времени трансляционной релаксации, динамических коэффициентов внутреннего трения, подвижности, диффузии, термодиффузии, конвекции, сдвиговой и объёмной вязкости, а также соответствующие им динамические модули упругости жидкого аргона от температуры, плотности и частоты внешнего возмущения. Показано, что полученные в диссертации результаты более общие и содержать в себе информацию о свойствах жидкостей со сферическими молекулами. [20-А, 21-А, 23-А, 50-А, 1-А, 77-А]

8. **Упрощённые** с учётом условия $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}} \cdot \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \gg 1$ системы уравнения обобщенной гидродинамики, использованы для описания явлений переноса и релаксации в многоатомных жидкостях. **Выяснены**, что в этом случае, динамические явления переноса в многоатомных жидкостях характеризуются в основном перекрестными релаксационными процессами с характерным временем релаксации τ_{tr} , при этом существенный вклад вносят и все три происходящие в жидкости релаксационные процессы. Показано, что направление трансляционных и вращательных потоков переноса массы в многоатомных жидкостях взаимно перпендикулярные, и вклад одного из них уменьшает значение другого. [11-А, 12-А, 21-А, 43-А, 52-А, 81-А]

9. Исследованы динамические вязкоупругие свойства полярных и неполярных многоатомных жидкостей. **Выявлены** связанные с не сферичностью молекул, дополнительные коэффициенты вязкости и соответствующие им динамические модули упругости. **Показано**, что закономерность частотной дисперсии динамических вязкоупругих параметров многоатомных жидкостей, как минимум имеют две релаксационные области с характерными временами релаксации τ_{tr} и $\tau_{эф} = \frac{10}{3} (\tau_{tr})^2 \frac{\tau_t + \tau_r}{\tau_t \tau_r}$. [6-А, 15-А, 19-А, 29-А, 32-А, 52-А, 74-А, 76-А, 79-А]

10. **Определены** аналитические выражения и с использованием потенциала Адхамова-Часовских для неполярных жидкостей и потенциала Штокмайера для полярных жидкостей **проведены** численные расчёты зависимостей значения характерных времён релаксации, коэффициентов внутреннего трения, подвижности, диффузии термодиффузии, сдвиговых и объёмных вязкостей жидких азота, кислорода, аммиака и воды от температуры, плотности. Результаты сопоставлены с экспериментальными данными и **показано**, что полученные выражения лучше описывают свойства динамических параметров переноса многоатомных жидкостей в областях низких температур и высоких плотностей. [22-А, 24-А, 18-А, 29-А, 32-А, 52-А, 75-А,]

11. Термодинамическими методами исследованы ориентационные аномальные поведения равновесных теплофизических параметров НЖК. Определены аналитические выражения, описывающие закономерность

зависимости ориентационного параметра порядка, скачки теплоёмкости и сжимаемости от температуры и давления с учётом вкладов дальнего ориентационного порядка и флуктуации ориентационного порядка. Показано, что аномальные поведения теплофизических параметров НЖК вдали от точки фазового перехода определяются вкладом дальнего ориентационного порядка, а вблизи точки фазового перехода флуктуацией ориентационного параметра порядка НЖК. [25-А, 16-А, 18-А, 29-А, 66-А, 68-А, 70-А, 71-А, 82-А, 84-А]

12. В рамках определённого в диссертации локально-равновесного статистического ансамбля определены и молекулярные выражения структурных компонентов регулярной части теплоёмкости НЖК. **Сформулировано** общее аналитическое выражение для теплоёмкости НЖК позволяющее исследовать зависимость теплоёмкости НЖК от температуры и давления в нематической и изотропной фазах. **Выявлено** одно из возможных условий существования ближнего ориентационного порядка (short order) в изотропной фазе НЖК. [25-А, 66-А, 70-А, 71-А, 72-А, 82-А, 84-А]

13. Термодинамическими и молекулярно-статистическими методами **исследованы** ориентационные упругие свойства НЖК. Определены макроскопические и молекулярные аналитические выражения для соответствующих модулей упругости, позволяющие описать зависимости ориентационных модулей упругости НЖК от температуры и давления, при деформациях типа поперечного изгиба (splay), кручения (torsion) и продольного изгиба (band). Теоретические результаты соответствуют между собой и с экспериментальными данными. [66-А, 70-А, 71-А, 73-А, 78-А, 84-А].

14. **Определены** аналитические выражения и с использованием потенциалов Майера - Заупе и Макмиллана **проведены** численные расчёты закономерностей зависимости характерного времени вращательной релаксации, коэффициентов вращательного внутреннего трения, вращательной подвижности, вращательной диффузии и термодиффузии, ориентационных вязкостей, а также соответствующих им динамических модулей упругости ПАА (п-азоксианизола) от температуры, плотности и давления. Полученные выражения скорректированы для описания анизотропии коэффициентов переноса в НЖК. [26-А, 40-А, 45-А, 49-А, 52-А, 56-А, 64-А, 69-А, 80-А, 85-А].

15. **Исследована**, закономерность частотной дисперсии параметров переноса и их поведение при предельно низкочастотных и предельно высокочастотных динамических процессах. Показано, что при низкочастотных динамических процессах переносные свойства жидкостей описываются низкочастотными значениями коэффициентов переноса. Уравнения переноса являются дифференциальными уравнениями второго порядка в частных производных параболического типа, а механизмы переноса диффузионными.

При высокочастотных динамических процессах, переносные свойства жидкостей характеризуются высокочастотными значениями модулей упругости, уравнении переноса становятся дифференциальными уравнениями

второго порядка в частных производных гиперболического типа, а механизмы переноса будут волновыми. [14-А,21-А,29-А,32-А,54-А,59-А, 60-А, 83-А, 86-А]

РЕКОМЕНДАЦИИ. - **Предложенная** в диссертации более общая теоретическая модель жидкостей, состоящих из одинаковых жёстких молекул произвольной формы, может быть использована для исследования равновесных и неравновесных теплофизических свойств широкого класса жидкостей.

- **Обобщённое** для описания асимметричных жидкостей НФР, а также полученные с её использованием замкнутые системы уравнения обобщённой гидродинамики могут быть применены для исследования динамических процессов переноса в сложных жидких системах.

- **Упрощённые** с учётом особенности структуры жидкостей результаты, позволяют не только исследовать динамические процессы переноса в одноатомных и многоатомных жидкостях, в нематических жидких кристаллах, но и позволяют предсказать связанные с не сферичностью молекул новые эффекты.

- **Приведённые** в диссертации цифровые и графические материалы могут быть использованы для интерпретации, обоснования и экстраполяции теоретических и экспериментальных результатов по свойствам динамических параметров переноса жидкостей.

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

- **Представленные** в диссертации результаты численных расчётов значений теплофизических параметров и динамических коэффициентов переноса жидкостей в широком диапазоне изменения термодинамических параметров состояния и частоты внешнего возмущения, могут быть использованы, как база данных о значениях этих параметров при соответствующих условиях применения жидкостей.

- **Выявленная** в диссертации связь теплофизических параметров и динамических коэффициентов переноса жидкостей с формой, размером, массой и энергией взаимодействия молекул, могут быть использованы, как физическая основа создания новых жидких материалов с заданными теплофизическими и другими физико-техническими свойствами.

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

Приведенные в диссертации более общей модель, методы исследования и аналитические результаты могут служить основой для развития теории и более широкого исследования неравновесных свойств различных жидких систем.

Ключевые слова: молекулярно-статистическая теория, явление переноса, релаксационные процессы, диффузия, вязкоупругость, асимметричные жидкости, нематические жидкие кристаллы.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ:

По теме диссертации опубликованы более 85 работ, из них 32 в рецензируемых журналах.

Публикации в рецензируемых журналах

1–А. Абдурасулов, А.А. О неравновесной статистической функции распределения асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов. // Доклады Академии наук Республики Таджикистан. –1998. –Т. XLI, №3–4. – С.36–41.

2–А. Абдурасулов, А.А. Об уравнениях обобщенной гидродинамики асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов // Доклады Академии наук Республики Таджикистан. –1999. – Т. XLII, №10. С. 42–45.

3–А. Абдурасулов, А.А. К статистической теории явления диффузии в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Нормуродов, Ф.К. Муродов // Вестник педагогического университета (сер. ест. наук). – 1999. №7. С. 46–51.

4–А. Абдурасулов, А.А. К теории динамических диффузионных процессов в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф.К. Муродов // Доклады Академии наук Республики Таджикистан. –2002. –Т.XLV, №10. – С. 12–16.

5–А. Абдурасулов, А.А. Об асимптотических поведении коэффициентов самодиффузии в асимметричных жидкостях. [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Нормуродов, Ф. Муродов // Вестник педагогического университета (сер. ест. наук). – 2002. - №3. – С. 30–33.

6–А. Абдурасулов, А.А. К статистической теории динамических вязкоупругих процессов в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов // Докл. АН РТ, 2002 г., т. XLV, № 9, с. 36–41.

7–А. Абдурасулов, А.А. До статистичної теорії динамічних процесів у молекулярних рідинах. [Текст] / А.А. Абдурасулов // Вісник Київського нац. Унів. ім. Т. Шевченка (сер. Фізика). - 2002, №4, с. 52–56.

8–А. Абдурасулов, А.А. К теории динамических диффузионных процессов в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Муродов Ф. // Докл. АН РТ. – 2002. – т.45, №10. – С. 12–16.

9–А. Абдурасулов, А.А. О вязкоупругих коэффициентах асимметричных жидкостей при динамических процессах [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими // Докл. АН РТ. – 2003. Т. XLVI, № 10. – С. 18–22.

10–А. Абдурасулов, А.А. К статистической теории релаксационных процессов в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, С. Одинаев, Ф. Муродов // Украинский физический журнал. – 2005. –Т.15, №7. – С. 669 – 677.

11–А. Абдурасулов, А.А. К статистической теории явлений переноса и релаксации в асимметричных жидкостях [Текст] / А. Рахими, Н.Б. Шохайдаров // Вестник Таджикского национального университета (научный журнал).-2006. Т.31, №5- С.103–108.

12–А. Абдурасулов, А.А. К молекулярной теории динамических процессов массопереноса в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов // Вестник технического университета. 2008. – №1. – С. 18 – 23.

13–А. Абдурасулов, А.А. Общие формулы для коэффициентов переноса и соответствующие им модули упругостей в жидкостях с молекулами произвольной формы [Текст] / А.А. Абдурасулов, М.И. Салахутдинов // Жидкие кристаллы и их практическое использование. – 2009. – вып. 4 (30). – С. 26–36.

14–А. Абдурасулов, А.А. Исследование частотной дисперсии сдвиговой вязкости жидкого азота и кислорода в зависимости от плотности и температуры

[Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов, Х.М. Мирзоаминов, Д.М. Акдодов // Доклады НАН Таджикистана. –2011. – Том 54. – №7. – С.549 - 555.

15–А. Abdurasulov, A.A. Dispersion of dynamic modules of elasticity of simple liquids for different types of decay of flow relaxations [Текст] / S. Odinaev, A.A. Abdurasulov // Journal of Molecular Liquids. – 2012. – N 176. – PP. 79–85.

16–А. Абдурасулов, А.А. Изучение законов соответственных состояний вязких свойств простых жидкостей [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов, Д.М. Акдодов, Х.М. Мирзоаминов // Доклады НАН Таджикистана. –2012. –Том 55. – №2. – С. 126 –131

17–А. Абдурасулов, А.А. Исследование коэффициентов сдвиговой и объемной вязкости многоатомных жидкостей в зависимости от параметров состояния [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов // Укр.физ.журн. – 2013. – Т. 58, №9. – С.827–835.

Abdurasulov, A. Research of the Shear and Volume viscosity coefficients in multiatomic Liquids and their dependences on the state Parameters [Текст] / S. Odinaev, A.A. Abdurasulov // Ukr. J. Phys.–2013. –Vol. 58, No 9. – PP. 827–835.

18–А. Абдурасулов, А.А. Изучение закона соответственных состояний вязких свойств классических жидкостей [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов // Теплофизика высоких температур. – 2013.–Т.51, №4. – С. 1–8.

Abdurasulov, A. Study of the Law of Corresponding States of Viscous Properties of Classical Liquids [Текст] / S. Odinaev S., Abdurasulov A. // High Temperature. 2013. Vol. 51. No. 4, pp. 1–8

19–А. Абдурасулов, А.А. Общие аналитические выражения для динамических вязкоупругих коэффициентов жидкостей с произвольными формами молекул [Текст] / А.А. Абдурасулов // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. – 2016. – № 4(36),. – С. 19–25.

20–А. Абдурасулов, А.А. О динамических вязкоупругих свойствах некоторых простых моделей асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими, Н.Б. Шоайдаров // Вестник Тадж. Нац. Унив. – 2016. – № 1/3(200). – С. 113–116.

21–А. Абдурасулов А.А. Исследование зависимости вязкоупругих параметров жидкого аргона от плотности, температуры и частоты [Текст] /А.А. Абдурасулов, А. Рахими. // Вестник Тадж. Нац. Унив. – 2016. – № 1/3(200). – С. 83–88.

22–А. Абдурасулов, А.А. Метод неполного термодинамического потенциала для нематических жидких кристаллов [Текст] /А.А. Абдурасулов, А.Д. Абдурасулов, С. Одинаев. //Политехнический вестник. Серия: интеллект, инновация, инвестиции. – 2019. –№4(48). – С.12–16.

23–А. Абдурасулов, А.А. О вкладе динамики изменении внутренних давлений в вязкоупругие свойства асимметричных жидкостей [Текст] / Н.Б. Шоайдаров, А.А. Абдурасулов, А.Д. Абдурасулов, С. Одинаев. // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция 2020.– № 4(52). – С. 20–25.

24–А. Абдурасулов, А.А. Об аномальном поведении теплоёмкости нематических жидких кристаллов при переходе в изотропную фазу [Текст] / А.А. Абдурасулов, А.Д. Абдурасулов, С. Одинаев. // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. –2020. –№ 4(52). –С.7–12.

25–А. Абдурасулов, А.А. О вкладе ближнего ориентационного и радиального порядка молекул в теплоёмкость изотропной фазы нематических жидких кристаллов [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов. // Известия НАН Таджикистана. –2022. –№2(187). – С. 37–48.

26–А. Абдурасулов, А.А. Исследование вращательных релаксационных процессов и ориентационных вязкоупругих свойств нематических жидких кристаллов

[Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. –2022. –№1(57). – С.19–24.

27–А. Абдурасулов, А.А. Молекулярно–статистическое исследование ориентационных упругих свойств нематических жидких кристаллов [Текст] / С. Одинаев, Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов. // Доклады НАН Таджикистана. – 2022. –Том 65. –№3–4. – С. 210–219.

28–А. Абдурасулов, А.А. О динамическом переносе массы в жидкостях с произвольными формами молекул [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. –2022. –№4(60). – С.20–24.

29–А. Абдурасулов, А.А. О динамических вязкоупругих свойствах нематических жидких кристаллов в широком диапазоне изменения частоты возмущения [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. –2022. – №4(64). – С. 7–15.

30–А. Абдурасулов, А.А. О характере спектра времен релаксации в простых жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов // Доклады АН Таджикской ССР. – 1991. - Т.34, №10. - С.628-631

31–А. Абдурасулов, А.А. Об оптимальном выборе радиальной функции распределения для простых жидкостей [Текст] / А.А. Адхамов, С. Одинаев, А.А. Абдурасулов. // Докл. АН. Тадж. ССР. –1989. –Том 32. –№8. – С.521–524.

32–А. Абдурасулов, А.А. Исследование частотной дисперсии сдвиговой вязкости жидких азота и кислорода в зависимости от температуры [Текст] /С. Одинаев, А.А. Абдурасулов, Х.М. Мирзоаминов, Д. Акдодов // Докл. АН. РТ. –2011. –Том 54, №7. – С.549–554.

Публикации в материалах конференции и других изданиях:

33–А. Абдурасулов, А.А. Термодинамика и статистическая гидродинамика нематических жидких кристаллов [Текст] /А.А. Абдурасулов. // В заключительном отчёте по теме «Исследование структуры и акустические свойства жидких кристаллов» инв. № Б.902532 14.04. 81.-ФТИ имени С.У. Умарова.–Душанбе 1981.-17 с.

34–А. Абдурасулов, А.А. Статистическая теория релаксационных процессов и явлений переноса в простых и асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов // В заключительном отчёте по теме «Исследовать кинетические и резонансные свойства твёрдых тел (конденсированные системы) Инв. № 02860011086, ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе. - 1986. – С.122–144.

35–А. Абдурасулов, А.А. Структурная релаксация и термоупругие свойства простых жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов // В заключительном отчёте по теме «Построит микроскопическую теорию фазовых переходов в дефектных кристаллах и жидкостях при наличии внешних воздействий». ГН № 01.07.003382. ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе. - 1999. – С. 113–180

36–А. Абдурасулов, А.А. О связи поступательной и вращательной диффузии в анизотропных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов. // Тезисы доклады Республиканской конференции молодых учёных. Душанбе. – 1982. – С. 56-57.

37–А. Абдурасулов, А.А. Оиди оператори статистикуи ғайримувожинати системаҳои асимметрии [Текст] / А.А. Абдурасулов // Фишурдаи маърузаҳои конференсияи илмӣ байналмилалӣ «Физикаи муҳитҳои конденсӣ» бахшида ба 50–солагии Донишгоҳи давлатии миллии Тоҷикистон» 24–25 июни соли 1997. ДДМТ. Душанбе. – С. 49.

38–А. Абдурасулов, А.А. Об уравнениях обобщенной гидродинамики асимметричных сред [Текст] / А.А. Абдурасулов // Тезисы доклады Международной конференции «Физика конденсированного состояния» посвящённое 70–летию академика А.А. Адхамова., 3–4 сентября 1998г. – ФТИ имени С.У. Умарова. - Душанбе. - С. 10.

39–А. Абдурасулов, А.А. О статистической теории явления самодиффузии в некоторых моделях асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов//Материалы научно–теоретической конференции профессорско–преподавательского состава ТГНУ посвященное «Дню науки». -Душанбе.-2000.–С. 24.

40–А. Абдурасулов, А.А. О характере времён релаксации в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов // Материалы-научно–практической конференции профессорско–преподавательского состава ТГНУ посвящённое «Дню науки». – Душанбе. - 2001. – С. 32.

41–А. Абдурасулов, А.А. К статистической теории вязкоупругих процессов в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов // Тезисы доклады Международной конференции «Физики конденсированного состояния. 11–12 октября 2001г. – - Душанбе. - С. 78.

42–А. Абдурасулов, А.А. О статистической теории упругих свойств асимметричных сплошных сред [Текст] / А.А. Абдурасулов // Тезисы научно–теоретической конференции посвящённое 50–летию Таджикского национального университета. - Душанбе, 1998г. – С. 56.

43–А. Абдурасулов, А.А. К статистической теории явления диффузии и релаксационных процессов в молекулярных жидкостях [Текст]/А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов // Сб. науч. трудов Налогово–правового института.–Душанбе.–2002.–№2.–С.11–16.

44–А. Абдурасулов, А.А. Молекулярная теория явления переноса и релаксации в сложных асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Нормуродов, Ф. Муродов / В сб. научных статей, посвященный 30 – летию физического факультета ТГПУ им. К. Джураева. - Душанбе. – 2002. – С. 127–135.

45–А. Абдурасулов, А.А. Динамические процессы массопереноса в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов.//В заключительном отчёте по теме: «Разработать способы выращивания новых сегнето–,пьезоэлектрических и сверхпроводящих кристаллов, исследовать их свойства и выдать рекомендации по их применению». ФТИ имени С.У. Умарова.-(1999–2003), ГР № 000 000 671.-Душанбе.-10 с.

46–А. Абдурасулов, А.А. О статистической теории релаксационных процессов и явлений переноса в некоторых моделях асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов. // Тезисы докладов Международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем». 5–6 октября 2004г. ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе. – С. 12.

47–А. Абдурасулов, А.А. Исследование динамических коэффициентов массопереноса в некоторых упрощенных моделях асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов // Тезисы докладов международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем». 5–6 октября 2004 г. ФТИ имени С.У. Умарова. Душанбе. – С.28–30.

48–А. Абдурасулов, А.А. О динамических коэффициентах вязкости асимметричных жидкостей [Текст] /А.А. Абдурасулов, А. Рахими А. // Тезисы докладов международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем».5-6 октября 2004 г.-ФТИ имени С.У. Умарова. Душанбе.– С.30–31.

49–А. Adurasulov, A.A. On molecular theory of dynamic processes of mass in

asymmetric liquids [Текст] / A.A. Abdurasulov, S. Odinaev, F. Murodov. // Abstracts 3rd International conference Physics of Liquids matter: modern problems. May 27–31, 2005, Kyiv, Ukraine. – P.58.

50–А. Абдурасулов, А.А. О динамическом коэффициенте диффузии жидкого аргона [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов, А. Рахими. //Материалы Международной конференции «Вклады Авиценны и Эйнштейна в развитии естествознания», посвящённая 100–летию СТО Эйнштейна. 7 ноября 2005 г. Хатлонский госуниверситет имени Н. Хисрава. – Курган-Тюбе. – С.15–21.

51–А. Абдурасулов, А.А. Численный расчет значения коэффициента внутреннего трения жидкого аргона [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов, А. Рахими. //Материалы Международной конференции «Вклады Авиценны и Эйнштейна в развитии естествознания», посвящённая 100–летию СТО Эйнштейна, 7 ноября 2005 г. Хатлонский госуниверситет имени Н. Хисрава. – Курган-Тюбе. – С. 21–23.

52–А Абдурасулов, А.А. О характере вращательных релаксационных процессов в нематических жидких кристаллах [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Нормуродов, Ф. Муродов, А. Рахими. //Тезисы докладов Научно–теоретической конференции «Современные проблемы физики и астрофизики» посвящённое 100–летию СТО и 40–летию Физического факультета ТГНУ. – 2005. Душанбе. – С. 58–59.

53–А. Абдурасулов, А.А. О вкладе ориентационного взаимодействия молекул в уравнении состояния асимметричных жидкостей [Текст] /А.А. Абдурасулов, Ф. Нормуродов, Ф. Муродов, А. Рахими. // Тезисы докладов научно–теоретической конференции «Современные проблемы физики и астрофизики» посвящённое 100–летию СТО и 40–летию Физического факультета Таджикского национального университета. – 2005. – Душанбе. С.69

54–А. Абдурасулов, А.А. О частотных асимптотиках вязкоупругих коэффициентов асимметричных жидкостей [Текст]/А.А. Абдурасулов, А. Рахими // Материалы международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем, 30–31 октября 2006г. – ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе. - С.50–51.

55–А. Абдурасулов, А.А. Некоторые вопросы статистической теории явлений переноса и релаксации в асимметричных жидкостях при динамических процессах [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими // Материалы II Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования в XXI веке». ч. 2. 15–16 марта 2007. - ТТУ им. ак. М.С. Осими, - Душанбе. – С. 56–60.

56–А. Абдурасулов, К статистической теории вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей. [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими, Н.Б. Шоайдаров // Материалы III Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования в XXI веке». 22–24 мая 2008 г. - ТТУ им. ак. М.С. Осими. – Душанбе. – С. 265–268.

57–А. Абдурасулов, А.А. О динамических коэффициентах переноса нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, М.И. Салахутдинов // Тезисы VII Международной конференции «Лиотропные жидкие кристаллы и наноматериалы», 22–25 сентября 2009г. - Иваново (Россия), – С. 59.

58–А. Abdurasulov, A.A. About determination of coefficient of the friction and times of the relaxation of simple liquids [Текст] / S. Odinaev, Kh. Mirzoaminov, A.A. Abdurasulov. // Abstracts International Conference Physics of Liquids matter: modern problems. May 21–24, 2010. - Kyiv, Ukraine. – P. 105.

59–А. Abdurasulov, A.A. Investigation of frequency dispersion of the viscosity

coefficient of simple liquids depending on the thermodynamic parameters of a state [Текст] / S. Odinaev, A. Abdurasulov, Kh Mirzoaminov. // Abstracts. EMLG–JMLG Annual Meeting 2010: Complex liquids. Modern trends in exploration, understanding and application. September 5–9, 2010. – L’viv, Ukraine. – PP. 38–39.

60–А. Abdurasulov, A.A. On determination of the of frequency dispersion of shear viscosity of simple liquids in dependence of nature of relaxation currents [Текст] / S. Odinaev, A. Abdurasulov, N. Sharifov. // Abstracts. EMLG/JMLG Annual Meeting: New outlook on molecular liquids; from short scale to long scale dynamics. 11–15 September 2011. - Warshaw, Poland. – P.83.

61–А. Abdurasulov, A.A. Investigation of the law of corresponding states for the viscous properties of classical liquids [Текст] / S. Odinaev, A. Abdurasulov, Kh. Mirzoaminov // Abstracts. EMLG/JMLG Annual Meeting: Molecular association in fluid faces and at fluid interfaces. 5–9 September 2012. - Eger, Hungary. P. 81

62–А. Абдурасулов, А.А. Об одном подходе в молекулярной теории динамических вязкоупругих свойств простых жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими, Н.Б. Шоайдаров. // Материалы VIII Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования», Часть – 2. 3–4 ноября 2016. - ТТУ им. ак. М.С. Осими, Душанбе. – С. 113–116.

63–А. Абдурасулов, А.А. Коэффициент внутреннего трения и исследование динамических вязкоупругих свойств простых жидкостей. [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими, Н.Б. Шоайдаров. // Известия Таджикского отделения Международной Академии наук высшей школы. Душанбе, 2016, – №1. – С. 36–42.

64–А. Абдурасулов, А.А. О вращательной вязкости нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими, Д.А. Абдурасулов. //Материалы VIII Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования», Часть – 2. 3–4 ноября 2016г. - ТТУ им. акад. М.С. Осими. Душанбе. – С. 116–120.

65–А. Абдурасулов, А.А. Исследование изохорной вязкости простых моделей асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, С. Одинаев, Н.Б. Шоайдаров. // Материалы Международной конференции “Проблемы современной физики” (посв. 110 лети акад. С.У. Умарова и 90 лети ак. А.А. Адхамова). ФТИ имени С.У. Умарова. - Душанбе. – 2018. –С. 92-94.

66–А. Абдурасулов, А.А. К термодинамике жидких кристаллов вблизи точки фазового перехода нематический жидкий кристалл–изотропная жидкость [Текст] / Абдурасулов А.А., Абдурасулов Д.А., Шоайдаров Н.Б. // Научные труды Инженерной академии Республики Таджикистан. – Душанбе. – 2019. – С. 61–65.

67–А. Абдурасулов, А.А. Локальные законы сохранения и вязкоупругие свойства асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров, Д.А. Абдурасулов. // Материалы Международной научно–практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана: проблемы и пути их решения». 19 декабря 2019г. - Филиал МЭИ в г. Душанбе. – С. 250–255.

68–А. Абдурасулов, А.А. Об аномальном поведении теплофизических параметров нематических жидких кристаллов вблизи фазового перехода НЖК–ИЖ [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. // Материалы Международной научно–практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана: проблемы и пути их решения». 19 декабря 2019. - Филиал МЭИ в г. Душанбе. – С. 237–242.

69–А. Абдурасулов, А.А. К теории вращательных релаксационных процессов и

динамических вязкоупругих свойств нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. //Материалы международной научно–практической конференции студентов, магистров, аспирантов и молодых учёных «Мухандис–2019». Часть 1, естественные науки. ТТУ имени академика М.С. Осими. – Душанбе. – 2019, С.78–84.

70–А. Абдурасулов, А.А. О связи термических и калорических параметров нематических жидких кристаллов вблизи точки фазового перехода НЖК–ИЖ [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. //Материалы научно–практической конференции «Современные проблемы физики конденсированного состояния и ядерной физики». 19 февраля 2020 г. -Таджикский национальный университет. - Душанбе. – С.106–109.

71–А. Абдурасулов А.А. О вкладе флуктуации ориентационного порядка в аномальном поведении теплоёмкости нематических жидких кристаллов [Текст] /А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. // Материалы научно–практической конференции на тему «Современные проблемы физики конденсированного состояния и ядерной физики» 19 февраля 2020 г., -Таджикский национальный университет. - Душанбе. – С.110–113.

72–А. Абдурасулов, А.А. К молекулярной теории теплоёмкости изотропной фазы нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров, Д.А. Абдурасулов. //Материалы Международной научно–практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана. Проблемы энергосбережения, энергоэффективности и использования возобновляемых источников энергии». 29–30 апреля 2021г. – филиал МЭИ в г. Душанбе. - С.312–317.

73–А. Абдурасулов, А.А. Исследование зависимости коэффициентов ориентационной деформации нематических жидких кристаллов от температуры и давления [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров. //Материалы международной научно–практической конференции «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития», часть 1. 12–13 ноября 2021г. - ТТУ им. акад. М.С. Осими. -Душанбе. – С.158–161

74–А. Абдурасулов А.А. Релаксационные процессы и динамические вязкоупругие свойства неполярных жидкостей [Текст] /А.А. Абдурасулов Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. // Материалы международной научно–практической конференции «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития» Часть 1. 12–13 ноября 2021 г.- ТТУ им. ак. М.С. Осими. – Душанбе. – С.110–113.

75–А. Абдурасулов, А.А. О вкладе перекрёстных релаксационных процессов в динамические вязкоупругие свойства полярных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Материалы международной научно–практической конференции. «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития». Часть–1. Естественные и гуманитарные науки. 12–13 ноября 2021г. - ТТУ им. ак. М.С. Осими. – Душанбе. – С. 180–186.

76–А Абдурасулов, А.А. Исследование термических релаксационных процессов в многоатомных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров, Д.А. Абдурасулов. //Материалы Республиканской научно–практической конференции “Наука–основа инновационного развития”. Раздел фундаментальные науки. ТТУ им. ак. М.С. Осими. - Душанбе. –2022. – С.298–302.

77–А. Абдурасулов А.А. Статистическое описание динамических вязкоупругих свойств жидкостей с произвольными формами молекул. 1. Жидкие системы со сферическими молекулами [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов, Д.А.

Абдурасулов.//Материалы VIII Международной конференции «Современные проблемы физики». 21–22 октября 2022г.- ФТИ имени С.У. Умарова. - Душанбе, – С. 22–27.

78–А. Абдурасулов, А.А. Статистическое описание динамических вязкоупругих свойств жидкостей с произвольными формами молекул. 2. Простые модели нематических жидких кристаллов [Текст]/С, Одинаев, Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов. //Материалы VIII Международной конференции «Современные проблемы физики». 21–22 октября 2022г.- ФТИ имени С.У. Умарова. - Душанбе, – С. 30–35.

79–А. Абдурасулов, А.А. К статистической теории динамических вязкоупругих свойств многоатомных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров, Д.А. Абдурасулов. // Материалы VIII Международной конференции «Современные проблемы физики», 21-22 октября 2022г.-ФТИ имени С.У.Умарова. -Душанбе, -С.134–139.

80–А Абдурасулов, А.А. О вкладе давления в динамические вязкоупругие свойства нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Р.С. Яздонкулов, В.Т. Бехбудов. //Материалы VIII Республиканской научно–практической конференции «Наука основа инновационного развития», , апрель 2023г. - ТТУ им. акад. М.С. Осими. – Душанбе. - С. 78–83.

81–А. Абдурасулов, А.А. О связи коэффициентов диффузии и внутреннего трения в жидкостях с произвольными формами молекул [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Ф.Р. Азизуллоев. // Материалы VIII Республиканской научно–практической конференции «Наука основа инновационного развития». апрель 2023г. - ТТУ им. акад. М.С. Осими,– Душанбе. - С.74–78.

82–А. Абдурасулов, А.А. О температурной зависимости теплоёмкости нематических жидких кристаллов в окрестности точки фазового перехода НЖК–ИЖ [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров. // Материалы научно–практической конференции «Развитие и достижения физической науки в годы независимости». 25-26 августа 2023г. -ФТИ им. С.У.Умарова. – Душанбе. – С.40–43.

83–А. Абдурасулов, А.А. Частотная дисперсия динамических вязкоупругих коэффициентов многоатомных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров. // Тезисы международной конференция «Современные технологии научного приборостроения и информационно–измерительных систем», 23 июня 2023г. - Научно–технологический центр уникального приборостроения Российской Академии наук. - Москва – С. 188–189.

84–А. Абдурасулов А.А. О температурной зависимости теплоёмкости нематических жидких кристаллов в изотропной окрестности точки фазового перехода НЖК – ИЖ [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов // Тезисы международной конференция «Современные технологии научного приборостроения и информационно–измерительных систем», 23 июня 2023г. - Научно–технологический центр уникального приборостроения Российской Академии наук. - Москва с. 186–187.

85–А. Абурасулов А.А. О вкладе движении центра инерции молекул нематических жидких кристаллов в диффузионном переносе массы [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Ф.Р. Азизуллоев. // Материалы Международной научной конференции «Физические и технические науки в пространстве СНГ». Душанбе, ФТИ им. С.У. Умарова. 29–30 ноября 2024г.– С. 24–29.

86 – А. Абдурасулов, А.А. О диффузионно-волновых механизмах переноса массы в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов//Мат.14 Международной теплофизической школы (МТФШ-14) «Теплофизические исследования возобновляемая энергетика». 9-10 декабря 2024г. ТТУ им. ак. М.С. Осими.-Душанбе. – С. 139-143.

АННОТАЦИЯ

диссертации Абдурасулова Анвара Абдурасуловича на тему «Статистическая теория релаксационных явлений и динамических процессов переноса в жидкостях с произвольными формами молекул», представленной на соискание учёной степени доктора физико-математических наук, по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

Ключевые слова: молекулярно-статистическая теория, явление переноса, релаксационные процессы, диффузия, вязкоупругость, асимметричные жидкости, нематические жидкие кристаллы.

Основной целью диссертации является построение последовательной, внутренне согласованной молекулярно-статистической теории явлений переноса и релаксации в сложных жидких системах, состоящих из жёстких молекул произвольной формы, на основе обобщения метода неравновесной функции распределения (НФР).

Объектами исследования являются сложные асимметричные жидкие системы, состоящие из одинаковых жёстких молекул произвольной формы.

Предметами исследования являлись теоретические исследования и аналитические описания закономерностей зависимости основных параметров переноса и релаксации в сложных жидких системах, от изменения термодинамических параметров состояния и частоты внешнего возмущения в общем виде и для конкретных классов жидкостей.

Научная новизна полученных результатов.

Предложена более общая, чем модель простых жидкостей, состоящая из упругих сферических молекул, модель сложных жидкостей, состоящая из одинаковых жёстких молекул произвольной формы. Метод НФР **обобщён** для описания динамических процессов переноса и релаксационных явлений в сложных асимметричных жидкостях.

Получена замкнутая компактная система уравнений обобщённой гидродинамики позволяющая описать термические релаксационные явления и динамические процессы переноса массы, импульса и момента импульса в сложных асимметричных жидкостях.

Упрощённые, с учётом особенности молекулярной структуры конкретного класса жидкостей, уравнения обобщённой гидродинамики, **использована** для описания релаксационных явлений и динамических процессов переноса массы, импульса и момента импульса в простых одноатомных жидкостях, в полярных и неполярных многоатомных жидкостях, а также в нематических жидких кристаллах.

Определена закономерность релаксационной корреляции трансляционных и вращательных потоков переноса, **выявлены** связанные с несферичностью молекулы дополнительные коэффициенты переноса.

Показано, что механизм переноса в жидкостях, при низкочастотных динамических процессах является диффузионным, а при высокочастотных процессах, волновым.

Возможности использования результатов. Полученные в диссертации аналитические выражения и формулы могут быть использованы для определения и расчёта, как равновесных, так и динамических теплофизических параметров жидкостей, при различных условиях эксплуатации. **Выявленная** в диссертации связь теплофизических параметров и динамических коэффициентов переноса жидкостей с формой, размером, массой и энергией взаимодействия молекул, могут быть использованы, как физическая основа создания новых жидких материалов с заданными теплофизическими и другими физико-техническими свойствами. **Приведённые** в диссертации результаты численных расчётов значений теплофизических и переносных параметров жидкостей, могут быть использованы, как база данных о значениях этих параметров при соответствующих условиях применения этих жидкостей;

ШАРҲИ МУХТАСАРИ

диссертатсияи Абдурасулов Анвар Абдурасулович дар мавзӯи “Назарияи статистикийи ҳодисаҳои релаксационӣ ва рӯйдодҳои динамикийи интиқол дар моеъҳои молекулаҳояшон шакли дилхоҳ дошта”, ки барои дарёфти дараҷаи илмӣ доктори илмҳои физика ва математика аз рӯйи ихтисоси 01.04.02 – Физикаи назариявӣ пешниҳод шудааст

Вожаҳои калидӣ: назарияи молекулавӣ-статистикӣ, ҳодисаҳои интиқолӣ, падидаҳои релаксационӣ, диффузия, ҳаспакию чандирӣ, моеъҳои асимметрӣ, моеъкристаллҳои нематикӣ.

Мақсади асосии диссертатсия дар асоси тақмили усули функцияи ғайримувозинатии тақсимои молекулаҳо таҳия намудани назарияи молекулавӣ-статистикийи муккамалу пайдарпай ва мантиқан алоқаманди падидаҳои интиқолу релаксатсия дар моеъҳои молекулаҳояшон шакли дилхоҳ дошта, мебошад

Объекти таҳқиқот моеъҳои мураккаби асимметрии молекулаҳояшон саҳти шаклашон дилхоҳ, мебошад.

Предмети таҳқиқот омӯзиши назариявӣ ва таҳқиқи аналитикийи қонуниятҳои вобастагии бузургҳои асосии интиқолу релаксатсия дар моеъҳои мураккаб, аз тағйирёбии параметрҳои термодинамикийи ҳолат ва басомади ошубҳои беруна дар шакли умумӣ ва барои гуруҳҳои алоҳидаи моеъҳо, мебошад

Навгонии натиҷаҳои ҳосилшуда.

Амсилаи аз амсилаи моеъҳои соддаи аз молекулаҳои курашакли чандирӣ иборат буда дида умумитари моеъҳои шакли молекулаҳояшон дилхоҳ пешниҳод шудааст. **Усули НФР** барои таҳқиқи падидаҳои динамикийи интиқол ва релаксатсия дар моеъҳои мураккаби асимметрӣ тақмил дода шудааст.

Манзумаи суфтаю сарбастаи **муодилаҳои гидродинамикаи умумикардашуда** барои омӯхтани релаксатсияҳои термикӣ, рӯйдодҳои динамикийи интиқоли масса, импульс ва моменти импульс дар моеъҳои мураккаби асимметрӣ таҳия карда шудаанд.

Муодилаҳои бо назардошти хусусиятҳои ҳоси сохтори моеъҳои мушаххас содакардашудаи гидродинамикаи умумикардашуда, барои таҳқиқи падидаҳои релаксационӣ ва рӯйдодҳои динамикийи интиқоли масса, импульс ва моменти импульс дар моеъҳои содаи якатома, моеъҳои бисёратомаи кутбӣ ва ғайрикутбӣ, инчунин дар меъкристаллҳои нематикӣ, истифода шудаанд.

Қонуниятҳои алоқамандии релаксационии селҳои транслясионӣ ва чархишии интиқол муайян карда шуда, дар заминаи ғайрисферӣ будани молекулаҳо ҳосилшавии коэффисиентҳои иловагии интиқол, ошкор карда шудааст.

Нишон дода шудааст, ки механизми интиқол дар моеъҳо ҳангоми рӯйдодҳои динамикийи пастбасомад диффузионӣ буда, ҳангоми рӯйдодҳои динамикийи баландбасомад мавҷӣ мешавад.

Имкониятҳои истифодаи амалии натиҷаҳо. Ифодаҳои аналитикӣ ва формулаҳои дар диссертатсия ҳосил карда шуда, барои омӯзиш ва ҳисобу китоби бузургҳои гармофизикийи ҳолатҳои мувозинатӣ ва ғайримувозинатии моеъҳои гуногун истифода шуда метавонанд. Робитаи дар диссертатсия барқарор кардашудаи бузургҳои гармофизикӣ ва коэффисиентҳои динамикийи интиқоли моеъҳо бо шакл, андоза, масса ва энергияи таъсири мутақобилаи молекулаҳо, ҳамчун заминаи физикийи ҳосилкунии моеъҳои нави ҳосиятҳои дилхоҳи гармофизикӣ ё дигар ҳосиятҳои физикийи техникӣ дошта, истифода шуда метавонанд.

Натиҷаи ҳисобкунии адабии дар диссертатсия овардашудаи қиматҳои параметрҳои гармофизикӣ ва интиқолии моеъҳо, метавонанд ба сифати ҳазинаи маълумот доир ба қиматҳои ин бузургҳо дар шароитҳои гуногуни татбиқи моеъҳо, истифода шаванд.

ANNOTATION

Dissertation by Abdurassulov Anvar Abdurassulovich on the topic **"Statistical Theory of Relaxation Phenomena and Dynamic Transport Processes in Liquids with Arbitrary Molecular Shapes,"** submitted for the degree of Doctor of Physical and Mathematical Sciences in the specialty 01.04.02 – Theoretical Physics.

Keywords: Molecular-statistical theory, transport phenomena, relaxation processes, thermal relaxation, structural relaxation, diffusion, viscoelastic parameters, simple and polyatomic liquids, nematic liquid crystals.

The main objective of the dissertation is to develop a consistent and internally coherent molecular-statistical theory of transport and relaxation phenomena in complex liquid systems composed of rigid molecules with arbitrary shapes, based on the generalization of the non-equilibrium distribution function (NDF) method.

The objects of study are complex asymmetric liquid systems composed of identical rigid molecules of arbitrary shape.

The subjects of study are theoretical investigations and analytical descriptions of the regularities governing the dependence of fundamental transport and relaxation parameters in complex liquid systems on variations in thermodynamic state parameters and the frequency of external perturbations, both in general form and for specific classes of liquids.

Scientific Novelty of the Results Obtained

A more general model of complex liquids, consisting of identical rigid molecules of arbitrary shape, is proposed as an alternative to the simpler model of liquids composed of elastic spherical molecules. The NDF method has been extended to describe dynamic transport processes and relaxation phenomena in complex asymmetric liquids.

A closed and compact system of generalized hydrodynamic equations has been derived, enabling the description of thermal relaxation phenomena and dynamic transport processes of mass, momentum, and angular momentum in complex asymmetric liquids.

Simplified versions of the generalized hydrodynamic equations, adapted to the molecular structure of specific classes of liquids, have been used to describe relaxation phenomena and dynamic transport processes in simple monatomic liquids, in polar and nonpolar polyatomic liquids, as well as in nematic liquid crystals.

The regularities of relaxation correlation between translational and rotational transport fluxes have been determined, and additional transport coefficients associated with molecular nonsphericity have been identified.

It has been demonstrated that in liquids, the transport mechanism follows a diffusive nature in low-frequency dynamic processes and a wave-like nature in high-frequency processes.

Practical Applications of the Results

The analytical expressions and formulas obtained in the dissertation can be used to determine and calculate both equilibrium and dynamic thermophysical parameters of liquids under various operating conditions. The established relationship between the thermophysical parameters and dynamic transport coefficients of liquids with molecular shape, size, mass, and interaction energy can serve as a physical basis for designing new liquid materials with specific thermophysical and other physicochemical properties. The numerical calculations of thermophysical parameters presented in the dissertation can serve as a database for these parameters under relevant application conditions.

ВАЗОРАТИ МАОРИФ ВА ИЛМИ ҶУМҲУРИИ ТОҶИКИСТОН
ДОНИШГОҲИ ТЕХНИКИИ ТОҶИКИСТОН
ба номи академик М.С. Осимӣ

Ҳуқуқи дастнавис

УДК:532.1+532.7+532.13+532.72+538.9 +538.93

Абдурасулов Анвар Абдурасулович

НАЗАРИЯИ СТАТИСТИКИИ ҲОДИСАҲОИ РЕЛАКСАТСИОНӢ ВА
ПАДИДАҲОИ ДИНАМИКИИ ИНТИҚОЛ ДАР МОЕЪҲОИ
МОЛЕКУЛАҲОЯШОН ШАКЛИ ДИЛҲОҲДОШТА

АВТОРЕФЕРАТИ

диссертатсия барои дарёфти дараҷаи илмии доктори илмҳои физикаю
математика аз рӯи ихтисоси 01.04.02 – Физикаи назариявӣ

Душанбе – 2025

Диссертатсия дар кафедраи физикаи Донишгоҳи техникии Тоҷикистон ба номи академик М.С. Осимӣ иҷро шудааст.

Мушовири илмӣ:

ОДИНАЕВ САИДМУҲАММАД

- академики АМИТ, Арбоби илм ва техникаи Тоҷикистон, доктори илмҳои физикаю математика, профессор, барандаи ҷоизаи байналмилалӣ «Ситораҳои Иттиҳод».

Муқарризони расмӣ:

Маломуж Николай Петрович - доктори илмҳои физикаю математика, профессор, профессори кафедраи физика ва астрономияи Донишгоҳи миллии Одесса ба номи И.И. Мечников (ш. Одесса, Украина).

Салихов Тағоймурод Ҳайтович - узви вобастаи АМИТ, доктори илмҳои физикаю математика, профессор, сарҳодими илмӣ Институти илмӣ-таҳқиқотии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон.

Қобилов Маруф Маҳмудович - доктори илмҳои физикаю математика, мудирӣ шӯбаи математикаи амалӣ ва механикаи Институти математикаи ба номи А. Ҷураевӣ АМИТ.

Муассисаи пешбар:

Институти илмҳои физикаю техникаи Донишгоҳи миллии Евразия ба номи Л.Н. Гумилёв (ш.Астана, Қазоқистон).

Ҳимояи диссертатсия санаи 14-уми октябри соли 2025, соати 14:00 дар маҷлиси Шурои диссертатсионӣ 6D.КOA-056 назди Донишгоҳи миллии Тоҷикистон бо нишонӣ: 734027, Ҷумҳурии Тоҷикистон, ш. Душанбе, шаҳраки Буни Ҳисорак, бинои таълимии № 16, факултети физика, дар толори диссертатсионӣ олимон баргузор мегардад.

Бо диссертатсия дар китобхонаи марказии илмӣ Донишгоҳи миллии Тоҷикистон бо нишонӣ 734025, ш. Душанбе, хиёбони Рӯдакӣ 17, инчунин дар сомонаи www.tnu.tj шинос шудан мумкин аст.

Автореферат “_____” _____ соли 2025 фириастода шуд.

Котиби илмӣ Шурои диссертатсионӣ номзади илмҳои физикаю математика, дотсент



Исломов З.З.

Мукаддима

Мубрамии мавзуи таҳқиқот. Моеъҳо муҳити аз ҳама зиёд паҳншуда ва ба таври васеъ истифодашаванда дар табиат мебошанд. Моеъҳо муҳитеанд, ки дар онҳо ё бо иштироки онҳо падидаҳои гуногуни физикӣ, химиявӣ, биологӣ ва дигар рӯйдодҳо сурат мегиранд. Аз ин рӯ, таҳқиқи хосиятҳои физикии моеъҳо на танҳо дар ҷанбаи омӯзиши илмӣ-амалии хосиятҳои ҳуди онҳо, инчунин дар самти равшани андохтан ба табиат ва механизми падидаҳои дар соҳаҳои номбурда ба вуқӯъ оянда, мубраму заруранд.

Бо кашф ва истифодаи васеи моеъкристиалҳо, тасаввурот нисбати мафҳуми ҳолати моегӣ ва доираи татбиқи онҳо хеле васеъ гардид. Дар оянда маъмул шудани мафҳуми сохторҳои нави ба ҳолати моеъҳо тааллуқ дошта, аз эҳтимол дур нест. Шояд, бо ҳамин сабабҳо, масъалаи таҳқиқи моеъҳо ҳамчун яке аз масъалаҳои мубрами физикаи муосир, ки аз дараҷаи омӯзиши он ҳаллу ҷасли бисёр масъалаҳои физикаи молекулавӣ, физикаи гармо, акустика, биофизика ва дигар соҳаҳои илм вобастаги дорад, маъмул боқӣ мондааст.

Дар шароити воқеии истифода ва дар шароити табиӣ ҳам, моеъҳо таҳти таъсири гуногуни беруна буда, бештар дар ҳолати ғайримувозинатӣ динамикӣ қарор доранд. Собит шудааст, ки хосиятҳои гармофизикии моеъҳо дар ҳодисаҳои динамикӣ аз ҳамин гуна хосиятҳои онҳо дар рӯйдодҳои статикӣ сустҷоришаванда фарқ мекунанду дараҷаи таъсири беруна ба моеъҳои гуногун низ, яхела набуда аз сохтори молекулавии моеъҳою, аз механизми падидаҳои релаксационии дар онҳо ҷойдошта, вобастагӣ доранд.

Масалан, муқаррар карда шудааст, ки хосиятҳои интиқолии моеъҳо дар рӯйдодҳои динамикии пастбасомад - $\nu\tau \ll 1$ (дар ин ҷо τ - вақти ҳоси падидаҳои релаксационии дохилӣ, ν - басомади таъсири беруна мебошанд) тавассути қиматҳои пастбасомади коэффитсиентҳои интиқол тавсиф мешаванд. Дар рӯйдодҳои баландбасомад ($\nu\tau \gg 1$) бошад, хосиятҳои интиқолии моеъҳо бо қиматҳои баландбасомади модулҳои чандирии мувофиқ шарҳ мешаванд. Дар соҳаи релаксатсия ($\nu\tau \sim 1$), хосиятҳои интиқолии моеъҳо ҳам бо қиматҳои коэффитсиентҳои динамикии интиқол ва ҳам бо қиматҳои модулҳои динамикии чандирии мувофиқ муайян карда мешаванд.

Аз ин рӯ, таҳқиқи хосиятҳои ғайримувозинатии гармофизикии моеъҳо умуман, хосиятҳои интиқолии онҳо дар рӯйдодҳои динамикӣ, аз ҷумла, бо назардошти хусусиятҳои сохтори молекулавӣ ва механизмҳои падидаҳои релаксационии дар дохилашон баамалоянда, масъалаи мубрами физикаи моеъҳо маҳсуб меёбад.

Агар хосиятҳои интиқолии моеъҳо дар рӯйдодҳои динамикӣ, дар асоси муодилаҳои гидродинамикаи муқаррарӣ, ки дар заминаи қонунҳои бақо бо истифода аз ифодаҳои маълуми Фик, Нютон ва Фурье барои селҳои интиқол таҳия карда мешаванд, омӯхта шаванд, қимати коэффитсиентҳои интиқол номуайян ва механизмҳои падидаҳои релаксационии дохилии дар моеъҳо ба амалоянда норавшан, боқӣ мемонанд.

Ҳангоми истифодаи муодилаҳои гидродинамикаи умумикардашуда (релаксационӣ), ки дар заминаи назарияҳои мукаммали молекулавӣ-

статистикии ғайримувозинатии моеъҳо таҳия карда мешаванд, таносуби байни селу градиентҳо дар шакли гидродинамикаи муқаррарӣ боқӣ мемонанд. Аммо, дар ин маврид ифодаҳои коэффитсиентҳои интиқол аз андоза ва вақти таъсири градиентҳо вобаста мешаванд. Ин имкон медиҳад, ки аз доираи муҳити яклухт берун шуда, саҳми сохтори молекулавӣ дар ташаккули хосиятҳои интиқолии моеъҳо ба назар гирифта шавад, соҳаи татбиқи қонунҳои гидродинамика аз микёси макроскопӣ то микроскопӣ васеъ карда шавад.

Айни замон, назарияи ягонаю пайдарпай ва мукаммали молекулавӣ-статистикии моеъҳо, ки ба таҳқиқи сифатӣ микдории хосиятҳои ғайримувозинатии моеъҳо дар рӯйдодҳои динамикии гуногун имкон меода бошад, дур аз анҷомёбист. Агар, назарияи молекулавӣ-статистикии моеъҳои сода, ки асосан ба амсилаи моеъҳои аз молекулаҳои курашаклҳои чандир иборат таъ мекунад, дар сатҳи нисбатан хуб таҳия шуда бошад, таҳқиқи хосиятҳои динамикию ғайримувозинатии моеъҳои мураккабтар пароканда буда, дар марҳилаи ташаккулбӣ қарор дорад.

Дар партави таҳлили дар боло зикршуда, масъалаҳои: таҳияи амсилаи физикии аз амсилаи моеъҳои молекулаҳои курашаклӣ чандир дида мукамалтар, барои моеъҳои мураккаб; таҳияи назарияи умумию пайдарпай ва мантиқан алоқаманди молекулавӣ-статистикии моеъҳои мураккаб; муайян кардани системаҳои сарбастаи муодилаҳои гидродинамикаи умумикардашуда, ки барои омӯзиши падидаҳои динамикии интиқол дар моеъҳои мураккаб имкон медиҳанд; таҳқиқи саҳми хусусиятҳои хоси сохтори моеъҳо ва механизмҳои рӯйдодҳои релаксационии дохилии дар онҳо ҷой дошта ва таъсири табиати ошӯби беруна ба хосиятҳои динамикии параметрҳои интиқол, вазифаҳои муҳими физикаи ҳолати гармофизикии моеъҳо буда, ҳамчун самтҳои асосии таҳқиқот дар диссертатсияи мазкур муайян шудаанд.

Дарачаи омӯзиши мавзӯи диссертатсия. Новобаста аз мушкилоти марбут ба хусусиятҳои хоси сохтор ва хосиятҳои физикии моеъҳо (набудани амсилаи содаи идеалӣ, чун амсилаи гази идеалӣ ё кристалли идеалӣ, набудани параметри хурди мувофиқ ва ғайраҳо), назарияи ҳолати моеъҳо тавонист бомуваффақият инкишоф ёбад. Дар марҳилаҳои аввали таҳқиқот моеъҳо ҳамчун гази зич тасаввур карда шуда, барои тавсифи хосиятҳои онҳо аз қонунҳо ва муодилаҳои барои газҳо муқарраршуда истифода менамуданд.

Маълум гардид, ки дар атрофи нуқтаи гудозиш бисёре аз хосиятҳои моеъҳо ба хосиятҳои ҷисмҳои сахт монанданд. Дар ин поя, тақрибан дар як вақт, параллел бо тасаввуроти газӣ, тасаввуроте пайдо ва мустақкам гардиданд, ки гуё моеъ ин ҷисмҳои сахти ковоканд. Дар ҳамин замина як силсила равандҳои гуногуни квазикристаллӣ дар назарияи моеъҳо (назарияи "сӯрохҳо" ё назарияи ҳаҷми озод дар вариантҳои гуногун) рӯи кор омаданд. Дар маҷмӯъ, масъалаи асосии назарияи молекулавӣ-статистикии ҳолати мувозинатии моеъҳо - муқаррар намудани робитаи байни хосиятҳои физикии параметрҳои гармофизикии мувозинатии моеъҳо бо хусусиятҳои сохторӣ-молекулавии онҳо, ҳалли худро ёфт.

Дар самти рушди назарияи молекулавӣ-статистикии хосиятҳои ғайримувозинатии моеъҳо низ, муваффақиятҳои назаррас ба даст оварда шуданд.

Як зумра корҳои таҳқиқоти оид ба тақмили муодилаи кинетикии Болсман барои тавсифи хосиятҳои ғайримувозинатии газҳои зич ва моеъҳо роҳандозӣ шуданд. Корҳои Энског ва пайравони ӯро дар ин самт ибратбахш ҳисобидан мумкин аст. Дар онҳо барои коэффисиентҳои интиқол ифодаҳои аналитикие пешниҳод шудаанд, ки андозаи молекулаҳо ва таъсири мутақобилаи онҳоро ба назар мегиранд.

Бо кашфи мавҷудияти тартиби радиалӣ дар моеъҳо, усулҳои нави молекулавӣ-статистикӣ омӯзиши хосиятҳои онҳо оғоз шуданд. Яке аз вариантҳои асосии ин усулҳо назарияи функсияҳои коррелятивии тақсимои молекулаҳо ва муодилаҳои кинетикии бо онҳо алоқаманд мебошад. Гояи асосии ин усулҳо, даст кашидан аз кӯшиши муайян намудани функсияҳои тақсимои N-заррагӣ ва диққат додан ба муайян кардани функсияҳои тақсимои якзаррагӣ, дузаррагӣ, сезаррагӣ ва s-заррагӣ мебошад. Таъкид карда мешавад, ки барои тавсифи хосиятҳои гармофизикии моеъҳо бо назардошти мавҷудияти тартиби наздики радиалӣ дар онҳо, доништан ва истифода намудани функсияҳои тақсимои якзаррагӣ ва дузаррагии молекулаҳо кофист. Ин усул барои омӯختани хосиятҳои мувозинатӣ ва ғайримувозинатии асосан моеъҳои сода имкон медиҳад. Барои омӯختани хосиятҳои ғайримувозинатии моеъҳо бо ин усул, зарурати таҳияи муодилаҳои кинетикӣ (МК) барои функсияҳои коррелятивии тақсимои якзаррагӣ, дузаррагӣ ва бисёрзаррагии молекулаҳо бо назардошти саҳми ҳамтаъсири (флуктуатсияи)-и дараҷаҳои гуногун ба миён меояд.

Аз солҳои 70-уми асри гузашта сар карда, дар маркази таваҷҷуҳи мутахассисон усули нисбатан сода, замонавӣ, аз рӯи умумияташ бо усули муодилаҳои кинетикӣ муқоисашаванда - усули оператори статистикӣ ғайримувозинатӣ (OCF) ё худ усули функсияи тақсимои ғайримувозинатӣ (FTF) барои системаҳои классикӣ, қарор дорад. Тибқи ақидаи муаллифаш, ин усул аз баъзе маҳдудиятҳои ба дигар усулҳо хос орист. Онро бомуваффақият барои омӯзиши хосиятҳои ғайримувозинатии моеъҳои аз молекулаҳои мураккаб иборат низ, истифода бурдан мумкин аст. Яке аз вазифаҳои асосии диссертатсия тақмил ва барои таҳқиқи хосиятҳои ғайримувозинатии гармофизикӣ ва интиқолии моеъҳои мураккаб истифода намудани усули FTF, мебошад.

Робитаи мавзӯи диссертатсия бо иҷрои мавзӯҳои давлатӣ ва барномаҳои илмӣ. Натиҷаҳои илмӣ диссертатсия ба ҳисоботи ҷамъбасти ва тақвими корҳои илмӣ-тадқиқотии банақшагирифтаи кафедраи физикаи Донишгоҳи техникии Тоҷикистон ба номи академик М.С. Осимӣ дохил шуда, дар ҳисоботи ҷамъбасти мавзӯҳои давлатӣ, ки таҳти рақамҳои 33-А, 34-А, 35-А, 45-А дар рӯйхати интишорот дар мавзӯи диссертатсия оварда шудаанд, инъикос ёфтаанд.

ТАВСИФИ УМУМИИ ТАДҚИҚОТ.

Мақсади асосии тадқиқоти диссертатсия:

- дар асоси тақмили усули FTF таҳия намудани назарияи умумию пайдарпай ва мантиқан алоқаманди молекулавӣ-статистикӣ моеъҳои мураккаб, ки аз молекулаҳои чандири шакли дилхоҳдошта иборатанд;
- пешниҳод ва истифодаи амсилаи физикии моеъҳои аз молекулаҳои чандири шаклашон дилхоҳ иборат, ки аз амсилаи моеъҳои молекулаҳояшон

курашакл умумитар буда, ба омӯзиши падидаҳои интиқол ва релаксатсия дар моеъҳои мураккаби асимметрии имкон медиҳад;

- ҳосил намудани системаи сарбасти муодилаҳои гидродинамикаи умумикардасуда ва ифодаҳои умумии барои бузургҳои динамикии интиқол дар моеъҳои асимметрии; таҳлил ва содакунии натиҷаҳои ҳосилшуда барои омӯзиши падидаҳои интиқол ва релаксатсия дар намудҳои мушаххаси моеъҳо;

Барои амалӣ намудани ҳадафҳои зикршуда, ҳалли вазифаҳои зерин ба нақша гирифта шуда буд:

- тавассути истифодаи шумораи бештари бузургҳои динамикии ҳолати ғайримувозинатии моеъҳоро муайянкунанда ва истифодаи дақиқтари координатаҳои кунҷӣ барои муайян намудани ҳолати молекулаҳои мураккаб дар фазои фазавӣ, такмил додани усули ФТҒ барои таҳқиқи падидаҳои интиқолу релаксатсия дар моеъҳои мураккаби асимметрии;

- ба сифати амсилаи физикии моеъҳои мураккаб интиҳоб намудани системаи моеъҳои молекулаҳояшон шакли дилҳох, массаи m ва моменти инерсияи I дошта; таҳияи амсилаи физикии мукамалтару бе муҳолифати дохилӣ ва нисбати амсилаи моеъҳои молекулаҳояшон саҳти курашакл умумитари моеъҳо;

- таҳияи системаи сарбасти муодилаҳои гидродинамикаи умумикардасуда, ки барои таҳқиқи ҳодисаҳои интиқоли динамикии масса, импульс ва моменти импульс дар моеъҳои мураккаби шакли молекулаҳояшон дилҳох, имкон медиҳад; соддагардонии ифодаҳои аналитикии ёфташуда барои таҳқиқи бузургҳои интиқол ва релаксатсия дар моеъҳои якатома ва бисёратома, инчунин дар моеъкристаллҳои нематикӣ.

- таҳқиқи хусусиятҳои хоси параметрҳои динамикии интиқоли моеъҳои баррасишаванда дар рӯйдодҳои динамикии басомадашон ниҳоят баланду ниҳоят паст ва дар соҳаи релаксатсия;

- амалӣ намудани ҳисобкуниҳои ададии қонуниятҳои вобастагии бузургҳои интиқоли моеъҳои якатома, бисёратома ва моеъкристаллҳои нематикӣ аз температура, зичӣ, фишор ва басомади ошубҳои беруна; муқоисаи натиҷаи ҳисобкуниҳо бо маълумоти таҷрибавӣ.

Объектҳои таҳқиқот моеъҳои асимметрии мураккаб, ки аз молекулаҳои саҳти шаклашон дилҳох иборатанд, мебошанд.

Предмети таҳқиқот омӯзиши назариявӣ ва тавсифи аналитикии қонуниятҳои вобастагии параметрҳои асосии интиқол ва релаксатсия дар системаҳои мураккаби моеъ аз тағйирёбии параметрҳои термодинамикии ҳолат ва басомади таъсири беруна дар шакли умумӣ ва барои намудҳои мушаххаси моеъ, мебошанд.

Навгони илмӣ таҳқиқот. Усулҳо ва объектҳои таҳқиқот классикӣ буда, аз ҷониби бисёр муҳаққиқон истифода шудаанд. Пешниҳоди амсилаи умумитари системаҳои моеъи мураккаб, ки аз молекулаҳои саҳти шаклашон дилҳох иборатанд ва ифодаи аналитикии тавассути истифодаи бузургҳои бебаҳои динамикию координатаҳои кунҷӣ такмилдодашудаи ФТҒ, нисбатан нав мебошанд. Ҳамаи натиҷаҳои дар асоси ин амсила ва ФТҒ дар диссертатсия ҳосилшуда, бори аввал дарёфт шудаанд. Аз ҷумла:

1. Амсилаи аз амсилаи моеъҳои содаи молекулаҳои шон курашакли чандир умумитари моеъҳои мураккаби аз молекулаҳои якхелаи саҳти шаклашон дилҳох иборат, **пешниҳод шудааст.**

2. Тавассути истифодаи шумораи бештари бузургҳои динамикии ҳолати ғайримувозинатии моеъҳоро тавсифкунанда ва дақиқтар истифода намудани координатҳои кунҷӣ, усули ФТҒ барои таҳқиқи падидаҳои динамикии интиқол ва релаксатсия дар моеъҳои асимметрии мураккаб, **такмил дода шудааст.**

3. Системаи сарбастаи муодилаҳои таҳавулотӣ бузургҳои динамикии ҳолати ғайримувозинатии моеъҳоро тавсифкунанда ва ифодаи ФТҒ таҳия шудаанд, ки барои саҳеҳ баҳо додани саҳми манбаҳои гидродинамикӣ ва релаксатсионӣ дар қонуниятӣ ба мурури вақт тағйирёбии бузургҳои динамикӣ дар рӯйдодҳои мувозинатӣ, мувозинатӣ-локалӣ, ва ғайримувозинатӣ, имкон медиҳанд.

4. Системаи сарбастаи муодилаҳои гидродинамикаи умумикардасуда таҳия шудаанд, ки барои таҳқиқи ҳодисаҳои интиқоли динамикии масса, импульс, моменти импульс дар моеъҳои мураккаби асимметрӣ бо назардошти саҳми падидаҳои релаксатсионии дохилӣ ва басомади ошубҳои беруна, мувофиқ мебошанд.

5. Таҳлили амиқи механизмҳои молекулавии падидаҳои релаксатсионии дохилии дар моеъҳои асимметрӣ баргузоршаванда, гузаронида шуда, нишон дода шудааст, ки тамоми вақтҳои релаксатсияи дар муодилаҳои гидродинамикаи умумикардасудаи моеъҳои асимметрӣ воридшуда, ба воситаи се вақти релаксатсияи асосӣ - транслясионӣ (τ_t), чархиш (τ_r) ва интерференсионӣ (τ_{tr}) ифода карда мешаванд.

Дар натиҷаи таҳлили ҳодисаҳои то кинетикии байнимолекулавӣ муайян карда шудааст, ки дар фосилаи байни даккаҳуриҳо ба молекулаҳои мураккаби ғайрисферӣ аз ҷониби молекулаҳои ҳамсоя, қувваҳои тасодуфии $F(t)$ ва моменти қувваҳои тасодуфии $N(t)$ таъсир намуда, ҳаракати онҳоро ошӯбнок ва диссипативӣ мегардонанд. Ин диссипатсияҳо тавассути корреляторҳои мувозинатии $\langle F(0)F(t) \rangle_0$, $\langle N(0)N(t) \rangle_0$, $\langle F(0)N(t) \rangle_0$ дар ифодаҳои вақтҳои ҳоси релаксатсияҳо ба назар гирифта шуда, барнагардандагии муодилаҳои интиқолро дар амсилаҳои баррасишавандаи моеъҳо, таъмин менамоянд.

6. Нишон дода шудааст, ки системаи бо назардошти шарт $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}} \cdot \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$ содакардасудаи муодилаҳои гидродинамикии умумикардасуда, ки дар онҳо релаксатсияҳои транслясионӣ нақши ососӣ доранд, падидаҳои интиқоли динамикии масса ва импульсро дар моеъҳои содаи якатома, қаноатбахш шарҳ медиҳанд.

7. Системаи бо назардошти шарт $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}} \cdot \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \gg 1$, содакардасудаи муодилаҳои гидродинамикаи умумикардасуда, барои таҳқиқи рӯйдодҳои динамикии интиқоли масса, импульс ва моменти импульс дар моеъҳои бисёртомаи кутбӣ ва ғайрикутбӣ истифода шудаанд. Барои коэффитсиентҳои динамикии интиқол ифодаҳои мушаххаси аналитикие ҳосил карда шудаанд, ки саҳми сохтори молекулавии моеъҳо ва релаксатсияҳои термикии дар онҳо баргузоршавандаро ба назар мегиранд.

8. Имконияти ҳосилшавии коэффитсиентҳои иловагии часпакӣ ва модулҳои чандирии динамикӣ, ки бо ғайрисферӣ будани молекулаҳо алоқаманданд, дар моеъҳои бисёратома амиқ нишон дода шудаанд. Муайян карда шудааст, ки дар омӯхтани хосиятҳои динамикии параметрҳои интиқоли моеъҳои бисёратома падидаҳои релаксационии омехта нақши ҳалқунанда мебозанд, аммо дар баробари ин ҳамаи се рӯйдодҳои релаксационии дигар низ, дар ин падидаҳо саҳм мегузоранд. Қонуниятҳои дисперсияи басомадии параметрҳои интиқоли моеъҳои бисёратома, камаш ду соҳаи релаксационии бо вақтҳои хоси τ_{tr} и $\tau_{эф} = \frac{10}{3} (\tau_{tr})^2 \frac{\tau_t + \tau_r}{\tau_t \tau_r}$ тавсифшаванда доранд.

9. Ҳисобкуниҳои ададии вобастагии вақтҳои хоси релаксатсия, коэффитсиентҳои соиши дохилӣ, ҳаракатнокӣ, диффузия, термодиффузия, часпакиҳои лағжиш ва ҳаҷмии моеъҳои бисёратома аз ҳарорат, зичӣ ва басомади таъсири беруна, амалӣ карда шудаанд. Ҳангоми ҳисобкуниҳо барои моеъҳои бисёратомаи ғайрикутбӣ (азоти моеъ ва оксигени моеъ) потенциали таъсири мутақобилаи чуфти молекулаҳои Адҳамов-Часовских ва барои моеъҳои бисёратомаи кутбӣ (аммиаки моеъ ва об) потенциали Штокмайер истифода шудаанд. Мувофиқати хуби натиҷаҳои назариявӣ ва маълумоти таҷрибавӣ ба даст оварда шудааст.

10. Бо усули термодинамикӣ хосиятҳои аномалӣ-тамоилии параметрҳои гармофизикии моеъкристаллҳои нематикӣ (МКН) дар атрофи нуқтаи табдили фазавии МКН-МИ (моеи изотропӣ) таҳқиқ карда шудааст. Барои параметри тартиби тамоилӣ, қисмҳои аномалӣ-тамоилии параметрҳои гармофизикии МКН ифодаҳои аналитикие ёфта шудаанд, ки вобастагии ин параметрҳоро аз температура ва фишор, аз ҷумла дар атрофи нуқтаи табдили фазавии МКН-МИ, тавсиф менамоянд.

11. Ташкилдихандаҳои молекулавии таркиби қисмати изотропии гармиғунҷоиши МКН муайян карда шуда, барои гармиғунҷоиши пурраи МКН ифодаи аналитикие ёфта шудааст, ки вобастагии гармиғунҷоиши МКН-ро аз температура ва фишор чӣ дар фазаи нематикӣ ва чӣ дар фазаи изотропӣ, тавсиф менамояд. Яке аз шартҳои имконпазирӣ мавҷудияти тартиби наздики тамоилӣ (short order) дар қисмати изотропии атрофи нуқтаи табдили фазавии МКН-МИ мушоҳида карда шудааст.

12. Бо усулҳои термодинамикию молекулавӣ-статистикӣ хосиятҳои чандирӣ-тамоилии МКН таҳқиқ карда шуда, ифодаҳои аналитикие муайян карда шудаанд, қонуниятҳои вобастагии модулҳои чандирии тамоилии МКН-ро аз ҳарорат ва фишор ҳангоми деформатсияҳои тамоилии навъи қатшавии арзӣ (splay), тобхурӣ (torsion) ва қатшавии тӯлӣ (bend) тавсиф менамоянд. Натиҷаҳои ҳосилшуда бо яқдигар ва бо маълумоти таҷрибавӣ ҳамоҳангии хуб доранд.

13. Қисмати бо назардошти шарт $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}} \cdot \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$ содакардашудаи муодилаҳои гидродинамикии умумикардашуда, ки дар онҳо падидаи релаксатсияи чархиш мақоми ҳалқунанда доранд, барои таҳқиқи рӯйдодҳои динамикӣ-тамоилии интиқоли масса ва моменти импульс дар МКН истифода шудаанд. Барои коэффитсиенти соиши чархиши дохилӣ, вақти релаксатсияи чархиш, коэффитсиентҳои ҳаракатпазирӣ чахишӣ, диффузия ва

термодиффузия, часпакиҳои тамоилӣ, инчунин барои модулҳои динамикии чандирии ба онҳо мувофиқ ифодаҳои аналитикӣ пешниҳод шуда вобастагии онҳо аз температура, зичӣ ва фишор ҳисоб карда шудааст. Мувофиқати сифатии ҳисобҳои назариявӣ бо натиҷаҳои таҷрибавӣ ошкор карда шудааст.

14. Табиати параметрҳои динамикии интиқоли моеъҳои баррасишаванда дар рӯйдодҳои динамикии басомадашон ниҳоят паст ва ниҳоят баланд таҳлил карда шудааст. Муайян карда шудааст, ки падидаҳои динамикии интиқол дар ин моеъҳо дар рӯйдодҳои динамикии пастбасомад бо қиматҳои пастбасомади коэффитсиентҳои интиқол тавсиф шуда, механизми интиқол диффузионӣ ва муодилаи интиқол муодилаи дифференсиалии тартиби дуҷуми навъи параболий мебошад. Дар рӯйдодҳои баландбасомад бошад падидаҳои динамикии интиқол бо қиматҳои баландбасомади модулҳои чандирӣ шарҳ дода шуда, механизми интиқол мавҷӣ мегардад ва муодилаи интиқол муодилаи дифференсиалии тартиби дуҷуми навъи гиперболий мешавад.

Аҳамияти назариявӣ ва илмӣ-амалии натиҷаҳо

Амсилаи нисбат ба амсилаи моеъҳои молекулаҳояшон курашакли чандир умумитари дар диссертатсия пешниҳодшуда, ҳангоми омӯхтани ҳосиятҳои ҳароратии мувозинатӣ ғайримувозинатии моеъҳои мураккаб, ҳамчун амсилаи базавӣ истифода шуда метавонад.

Натиҷаҳои содакардашудаи дар бобҳои 4-6-и диссертатсия овардашуда, на танҳо барои таҳқиқи падидаҳои динамикии интиқоли масса, импульс ва моменти импульс дар моеъҳои якатома, бисёратома ва моеъкристалҳои нематикӣ имкон медиҳанд, инчунин барои ошкор намудани коэффитсиентҳои иловагии интиқол ва дигар ҳосиятҳои ба ғайрисферӣ будани молекулаҳо алоқаманд замина мегузоранд.

Формулаҳои ифодаҳои аналитикии дар диссертатсия ҳосил кардашударо барои муайян намудан ва ҳисоб кардани қиматҳои бузургҳои гармофизикии мувозинатӣ, ғайримувозинатӣ ва коэффитсиентҳои интиқоли моеъҳои асимметрӣ дар шароитҳои гуногун, истифода кардан мумкин мебошад.

Натиҷаҳои ҳисобкуниҳои ададии қиматҳои бузургҳои гармофизикӣ ва коэффитсиентҳои интиқоли моеъҳо дар соҳаи васеи тағйирёбии ҳарорат, зичӣ, фишор ва басомади таъсири беруна, ки дар диссертатсия оварда шудаанд, ҳамчун хазинаи пойгоҳии додаҳо барои қиматҳои ин параметрҳо дар моеъҳои баррасишуда, дар шароити мувофиқ истифода шуда метавонанд.

Алоқамандии дар диссертатсия барқароркардашудаи параметрҳои гармофизикӣ ва интиқолии моеъҳо бо шакл, андоза, масса ва энергияи таъсири мутақобилаи молекулаҳо, метавонад ҳамчун асоси физикии ҳосилкунии моеъҳои нави ҳосиятҳои зарурии гармофизикӣ ва дигар ҳосиятҳои физикию техникӣ дошта, истифода шаванд.

Маводи дар диссертатсия овардашуда барои докторантҳо, аспирантҳо, унвонҷӯён, магистрҳо ва донишҷӯёни бахшҳои болоии ихтисосҳои физикӣ, физикӣ-химиявӣ ва технологӣ, ҳангоми хондани курсҳои махсус, иҷрои қорҳои диссертатсионӣ ва дипломӣ муфид буда метавонанд.

Нуктаҳои барои химоя пешниҳодшаванда:

1. амсилаи физикии системаи моеъҳое, ки аз молекулаҳои сахти шаклашон

дилхоҳ иборатанд;

2. ифодаҳои тавассути бештар намудани шумораи бузургҳои ҳолати ғайримувозинатии моеъхоро тавсифкунанда ва истифодаи дақиқтари координатаҳои кунҷӣ барои муайян намудани ҳолати молекулаҳои ғайрисферӣ дар фазои фазавӣ, такмилдодашудаи функсияҳои тақсимои мувозинатӣ, локаль-мувозинатӣ ва ғайримувозинатии молекулаҳо;

3. системаи сарбастаи муодилаҳои гидродинамикаи умумикардашуда, ки ба омӯхтани падидаҳои динамикии интиқоли масса, импульс ва моменти импульс дар моеъҳои асимметрӣ, дар соҳаи васеи тағйирёбии параметрҳои ҳолат ва басомади ошуб имкон медиҳанд;

4. системаи бо назардошти сохтори моеъҳои мушаххас содакардашудаи гидродинамикаи умумикардашуда ва ифодаҳои аналитикии бузургҳои динамикии интиқол, ки барои омӯхтани ҳодисаҳои интиқол ва релаксатсия дар моеъҳои якатома, бисёратома ва моеъкристаллҳои нематикӣ мувофиқ карда шудаанд;

5. натиҷаҳои таҳлили табиати бузургҳои динамикии интиқоли моеъҳо дар рӯйдодҳои динамикии басомадашон ниҳоят баланд ва ниҳоят паст; муайян кардани шарти афзалияти ҳосиятҳои интиқолӣ ё чандирӣ (механизмҳои диффузионӣ ё мавҷии интиқол) дар моеъҳо;

6. натиҷаҳои ҳисобкуниҳои ададии қонуниятҳои вобастагии параметрҳои динамикии интиқол дар моеъҳои содаи якатома, бисёратома ва моеъкристаллҳои нематикӣ аз температура, зичӣ, фишор ва басомад.

Дарачаи эътимоднокии натиҷаҳои дар диссертатсия овардашуда тавассути истифодаи усулҳои санҷидашудаи таҳқиқот, муқоисаи натиҷаҳои ҳосилшуда бо натиҷаҳои илмӣ пазируфта ва бо маълумоти таҷрибавӣ, инчунин аз рӯйи ҳосилкунии натиҷаҳои хусусии маълум аз ифодаҳои умумии ҳосилкарда шуда, ҳангоми содакуниҳои ҳудудӣ, таъмин карда шудаанд.

Мутобиқати диссертатсия бо шиносномаи ихтисоси илмӣ.

Мундариҷа ва натиҷаҳои диссертатсия ба банди 1-и шиносномаи ихтисоси 01.04.02 - Физикаи назариявӣ - «Назарияи ҳолати конденсии системаҳои макроскопӣ ва микроскопии классикӣ ва квантӣ. Омӯзиши ҳолатҳои гуногуни модда ва ҳодисаҳои физикӣ дар онҳо. Физикаи статистикӣ ва назарияи кинетикии системаҳои мувозинатӣ ва ғайримувозинатӣ» пурра ва бо бандҳои 5. "Рушди назария ва таҳқиқи ҳосиятҳою қонуниятҳои умумии динамикаи ғайрихатии системаҳои ғайримувозинатӣ" ва 6. "Амсиласозии системаҳои физикӣ" қисман, мутобиқат доранд.

Саҳми шахсӣ. Самти тадқиқот, ҳадафҳо ва масъалаҳои диссертатсия якҷоя бо мушовири илмӣ муайян карда шудаанд. Баъзе ҳисобкуниҳои ададӣ дар компютер бо унвонҷӯён, аспирантҳо ва ҳаммуаллифони мақолаҳои чопшуда анҷом дода шудаанд. Боқӣ, ҳамаи ҳисобҳои аналитикӣ, ҳосилкунии муодилаҳо ва ҳалли онҳо, таҳлил ва таҳияи натиҷаҳо дар диссертатсия ва дар интишороти илмӣ, ҳамаи натиҷаҳое, ки дар бастҳои «Навгониҳои илмӣ», «Аҳамияти

назариявӣ ва илмию амалии таҳқиқот», «Нуктаҳои ба ҳимоя пешниҳодшаванда», «Хулоса ва пешниҳодҳо»-и диссертатсия инъикос ёфтаанд, шахсан аз ҷониби диссертант иҷро шудаанд.

Тасвир ва амалисозии натиҷаҳои диссертатсия

Натиҷаҳои асосии диссертатсия борҳо дар семинарҳои илмии Институти физикаю техникаи ба номи С.У. Умарови АМИТ, Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, Донишгоҳи техникии Тоҷикистон ба номи академик М.С. Осимӣ баррасӣ шуда дастгирӣ ёфтаанд. Маводи диссертатсия инчунин дар конфронсҳои зерини байналмилалӣ, умумииттифоқӣ ва ҷумҳуриявӣ илмӣ, илмӣ-амалӣ арзёбӣ ва таҳлил шудаанд: Конференсияи илмии байналмилалӣ «Физикаи муҳитҳои конденсӣ» бахшида ба 50–солагии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон», 24-25 июни соли 1997. Душанбе; Международной конференции «Физика конденсированного состояния» посвящённое 70–летию академика А.А. Адхамова., 3–4 сентября 1998г. – ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе; Научно–теоретической конференции профессорско-преподавательского состава ТГНУ посвящённое «Дню науки». - Душанбе. – 2000; Научно–практической конференции профессорско-преподавательского состава ТГНУ посвящённое «Дню науки». – Душанбе, 2001; Международной конференции «Физики конденсированного состояния. Душанбе, 11–12 октября 2001г; Научно–теоретической конференции посвящённое 50–лети Таджикского национального университета. Душанбе, 1998г.; Международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем». 5–6 октября 2004г. ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе; 3rd International conference Physics of Liquids matter: modern problems. May 27–31, 2005, Kyiv, Ukraine; Международной конференции «Вклады Авиценны и Эйнштейна в развитии естествознания», посвящённая 100–лети СТО Эйнштейна. 7 ноября 2005 г. Хатлонский госуниверситет имени Н. Хисрава. Курган-Тюбе; Научно–теоретической конференции «Современные проблемы физики и астрофизики» посвящённое 100–лети СТО и 40–лети Физического факультета ТГНУ. 2005. Душанбе; Международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем, 30–31 октября 2006г. ФТИ имени С.У. Умарова. Душанбе; II Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования в XXI веке», 15–16 марта 2007. ТТУ им. академика М.С. Осими, Душанбе; III Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования в XXI веке». 22–24 мая 2008г. ТТУ им. академика М.С. Осими. Душанбе; VII Международной конференции «Лиотропные жидкие кристаллы и наноматериалы», 22–25 сентября 2009г. - Иваново (Россия); International Conference Physics of Liquids matter: modern problems. May 21–24, 2010. - Kyiv, Ukraine; EMLG–JMLG Annual Meeting 2010: Complex liquids. Modern trends in exploration, understanding and application. September 5–9, 2010. - Lviv, Ukraine; EMLG/JMLG Annual Meeting: New outlook on molecular liquids; from short scale to long scale dynamics. 11–15 September 2011. - Warsaw, Poland; EMLG/JMLG Annual Meeting: Molecular association in fluid faces and at fluid interfaces. 5–9 September 2012. Eger, Hungary; VIII Международной научно–практической конференции «Перспективы развития

науки и образования 3–4 ноября 2016. ТТУ им. академика М.С. Осими, Душанбе; VIII Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования», 3–4 ноября 2016г. - ТТУ им. академика М.С. Осими. Душанбе; Международной конференции “Проблемы современной физики” (посв. 110 лети академика. С.У. Умарова и 90 лети академика А.А. Адхамова). ФТИ имени С.У. Умарова. Душанбе; Международной научно–практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана: проблемы и пути их решения». 19 декабря 2019г. - Филиал МЭИ в г. Душанбе; Международной научно–практической конференции студентов, магистрантов, аспирантов и молодых учёных «Мухандис–201». Естественные науки. ТТУ им. академика М.С. Осими. Душанбе; Научно–практической конференции «Современные проблемы физики конденсированного состояния и ядерной физики». 19 февраля 2020 г. Таджикский национальный университет. Душанбе; Международной научно–практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана. Проблемы энергосбережения, энергоэффективности и использования возобновляемых источников энергии». 29–30 апреля 2021 г. Филиал МЭИ в г. Душанбе; Международной научно–практической конференции «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития», 12–13 ноября 2021г. - ТТУ им. академика М.С. Осими. –Душанбе; Республиканской научно–практической конференции “Наука–основа инновационного развития”. ТТУ им. академика М.С. Осими. 2022г. Душанбе; VIII Международной конференции «Современные проблемы физики». 21–22 октября 2022г.- ФТИ имени С.У. Умарова. Душанбе; VIII Республиканской научно–практической конференции «Наука основа инновационного развития». апрель 2023г. ТТУ им. академика М.С. Осими. Душанбе; Научно–практической конференции «Развитие и достижения физической науки в годы независимости». 25-26 августа 2023 г. ФТИ имени С.У. Умарова, Душанбе; Международной конференция «Современные технологии научного приборостроения и информационно–измерительных систем», 23 июня 2023г. Научно–технологический центр уникального приборостроения Российской Академии наук. Москва; Международной научной конференции «Физические и технические науки в пространстве СНГ». 29–30 ноября 2024г Душанбе, ФТИ имени С.У. Умарова; 14 Международной теплофизической школы (МТФШ-14) «Теплофизические исследования и возобновляемая энергетика» (ОНЛАЙН). 9-10 декабря 2024г. ТТУ им. академика М.С. Осими. Душанбе-Тамбов-Казань.

Интишорот. Натиҷаҳои асосии диссертатсия дар 86 кори илмӣ, аз ҷумла 32 мақола дар маҷаллаҳои тақризшавандаи Комиссияи олии аттестатсионии назди Президенти Ҷумҳурии Тоҷикистон нашр шудаанд, ки рӯйхати онҳо дар охири автореферат оварда шудааст.

Ҳаҷм ва сохтори диссертатсия.

Диссертатсия аз муқаддима, шаш боб, хулоса ва рӯйхати адабиёти истифодашуда иборат аст. Матни диссертатсия дар 253 саҳифаи ҷопи компютерӣ, 52 расм ва 40 ҷадвал баён шудааст. Рӯйхати адабиёт 304 номгӯро дар бар мегирад.

Шарҳи мухтасари бобҳои диссертатсия.

Дар муқаддима мубрамияти мавзӯ асоснок карда шуда, ҳадафҳо ва масъалаҳои диссертатсия муайян карда шудаанд. Вазъи таҳқиқоти илмӣ дар самти мавзӯи диссертатсия мухтасар шарҳ дода шуда, навгониҳои илмӣ, аҳамияти назариявӣ амалии натиҷаҳои ҳосилшуда, нуқтаҳои ба ҳимоя пешниҳодшаванда оварда шудаанд.

Дар боби якум таҳлили вазъи тадқиқоти таҷрибавӣ ва назариявӣ ҳодисаҳои интиқол ва релаксатсия дар моеъҳои тозаӣ яккомпонента оварда шудааст. Асосноккунии мавзӯи диссертатсия, таҳлили ифодаҳои аналитикӣ, ки поён методологии таҳқиқотро ташкил медиҳанд, ба ҳамин боб ворид шудаанд.

Дар боби дуюм мафҳумҳо, таърифҳо, модели физикӣ, принципҳо ва усулҳои асосии тадқиқоти ҳодисаҳои интиқол ва релаксатсия дар моеъҳои мураккаби асимметрии дар диссертатсия истифодашаванда, баррасӣ шудаанд.

Дар фасли якуми боб зарурати таҳияи системаи муодилаҳои гидродинамикии умумикардасуда барои таҳқиқи падидаҳои динамикии интиқол дар моеъҳо асоснок карда шудааст. Нишон дода шудааст, ки агар дар қонунҳои бақо аз ифодаҳои таҷрибавӣ маълум барои селҳо

$$\vec{J}_n(\vec{x}, t) = -D \frac{\partial n(\vec{x}, t)}{\partial \vec{x}}, \quad \sigma^{\alpha\beta}(\vec{x}, t) = -\eta \frac{\partial u^{\alpha}(\vec{x}, t)}{\partial x^{\beta}} \quad \text{и} \quad \vec{S}_e(\vec{x}, t) = -\lambda \frac{\partial T(\vec{x}, t)}{\partial \vec{x}}, \quad (1)$$

истифода намоем, падидаи интиқолро дар моеъҳо, дар доираи гидродинамикаи муқаррарӣ тавсиф дода метавонем. Аммо дар ин ҳолат, қиматҳои худӣ коэффитсиентҳои интиқол - диффузия (D), часпакӣ (η), гармигузаронӣ (λ) номаълум боқӣ мемонанд.

Ҳангоми тавсифи падидаҳои интиқол дар асоси муодилаҳои гидродинамикии умумикардасуда (релаксатсионӣ), ки дар заминаи усулҳои қотеи назарияи молекулавӣ- статистикий моеъҳо таҳия карда мешаванд, таносуби байни байни селҳо ва градиентҳо чун дар ифодаҳои (1) боқӣ мемонад, аммо селҳои интиқол релаксатсионӣ шуда, коэффитсиентҳои интиқол аз параметрҳои термодинамикии ҳолат ва басомади рӯйдодҳои динамикӣ вобаста мешаванд. Чунин коэффитсиентҳои интиқоли аз басомади таъсири беруна вобаста, дар диссертатсия **коэффитсиентҳои динамикии интиқол** номида шудаанд. Таҳияи муодилаҳои гидродинамикии умумикардасуда ва муайян кардани коэффитсиентҳои динамикии интиқол барои системаҳои моеъи мураккаби асимметрӣ яке аз вазифаҳои асосии диссертатсия маҳсуб меёбад.

Дар фасли дуюми боб амсилаи умумитари физикии моеъҳои асимметрӣ ва принсипи усулҳои тавсифи он пешниҳод шудааст.

Системаи моеъи аз N молекулаҳои якхелаи саҳти шаклашон дилхоҳи массаи m ва моменти инерсияи I дошта, баррасӣ шудааст. Барои муайян намудани ҳолати чунин молекулаҳои ғайрисферӣ дар фазои фазавӣ, аз маҷмуи координатҳои декартӣ ($x; y; z$) ва кунҷӣ ($\theta; \psi; \varphi$), инчунин аз компонентҳои импулс $\{p_{xi}; p_{yi}; p_{zi}\}$ ва моменти ҳоси импулси молекулаҳо $\{M_{xi}; M_{yi}; M_{zi}\}$ истифода шудаанд. Таъкид карда мешавад, ки чунин молекулаҳо дорои дараҷаҳои озодии пешравӣ ва чархиш мебошанд, ки ҳосиятҳои онҳоро бо қонунҳои физикаи классикӣ тавсиф додан, мумкин аст.

Амсилаи микроскопии системаи моеъ бо Гамильтониани зерин ифода карда мешавад:

$$H(\vec{x}_i, \vec{\theta}_i \vec{p}_i, \vec{M}_i) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{2I_{\alpha\beta}} + \sum_{i \neq j=1}^N \Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j) \right), \quad (2)$$

дар инҷо: $\Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j)$ потенциали ҳамтаъсироти чуфти молекулаҳо буда, ғайрисферӣ мебошад; $\vec{p}_i^\alpha = p_i^\alpha - m u^\alpha(\vec{x}, t)$ и $\vec{M}_i^\alpha = M_i^\alpha - I_{\alpha\beta} \omega^\beta(\vec{x}, t)$ – импульс ва моменти импульси молекулаҳо дар системаи координатаҳои бо моеъ ҳаракаткунанда; $u^\alpha(\vec{x}, t)$ и $\omega^\beta(\vec{x}, t)$ – суръатҳои макроскопии ҳаракати пешравӣ ва чархиши моеъ, мебошанд. Муодилаҳои ҳаракати молекулаҳо дар фазои фазавӣ бо муодилаҳои ҳаракат дар шакли муодилаҳои Гамильтон баррасӣ мешаванд.

Ҳолати ғайримувозинатии моеъ тавассути бузургиҳои динамикике тавсиф дода мешаванд, ки зичии локалиашон бо ифодаи зерин муайян карда мешавад:

$$\hat{P}_m(\vec{x}, \vec{\theta}) = \sum_i^N P_{mi} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_i), \quad (3)$$

дар ин ҷо: P_{mi} – ифодаи микроскопии бузургии динамикии баррасишаванда мебошад.

Тағйирёбии ҳолати системаи моеъ дар рӯйдодҳои динамикӣ бо муодилаҳои тағйирёбии $\hat{P}_m$ бо мурури вақт тавсиф мешаванд, ки шакли қонунҳои маъмули бақоро доранд:

$$\frac{\partial \hat{P}_m}{\partial t} = \frac{\partial \hat{J}_{mt}^\alpha}{\partial x^\alpha} - \frac{\partial (a^{\alpha\beta} \hat{J}_{mr}^\beta)}{\partial \theta^\alpha} + \hat{I}_m, \quad (4)$$

дар ин ҷо $\hat{J}_{mt}^\alpha$ и $\hat{J}_{mr}^\beta$ – зичии селҳои интиқоли $\hat{P}_m$ тавассути дараҷаҳои озоди транслясионӣ ва чархиши молекулаҳо; $\hat{I}_m$ – манбаи дохилии тағйирёбии $\hat{P}_m$ мебошанд. Агар $\hat{P}_m$ бузургии бақодор бошад, он гоҳ $\hat{I}_m = 0$.

Бо назардошти он, ки дар диссертатсия ҳамагӣ ду бузургии бақодор истифода мешаванд ва ба сифати бузургиҳои динамикии бебақо, ки ҳолати ғайримувозинатии моеъро тавсиф мекунанд, селҳои ҳамин ду бузургии бобақо истифода карда мешаванд ва муодилаи (4) барои бузургиҳои бобақою бебақо чунин меависем:

$$\frac{\partial \hat{P}_m(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + \vec{\nabla}_{\vec{x}, \vec{\theta}} \hat{J}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta}) = 0, \quad \frac{\partial \hat{J}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} = \hat{A}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta}) + \hat{I}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta}), \quad (5)$$

дар инҷо

$$\hat{A}_{m, tr} = -M_{t, r, tr} \vec{\nabla}_{\vec{x}, \vec{\theta}} \hat{P}_m(\vec{x}, \vec{\theta}), \quad \hat{I}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta}) = -\frac{\hat{J}_{m, tr, tr}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\tau_{m, tr, tr}} \quad (5a)$$

– мувофиқан манбаҳои гидродинамикӣ ва релаксатсионии тағйирёбии бузургиҳои динамикӣ мебошанд; $M_{t, r, tr}$ модули чандирии умумикардасуда; $\tau_{m, tr, tr}$ – вақти релаксатсия, ки тавассути дараҷаҳои озоди транслясионӣ (t), чархиш (r) ва таъсири байниҳамдигарии ин дараҷаҳои озод (tr) ҳосил карда мешаванд.

Бояд қайд намуд, ки сабти қонунҳои бақо дар шакли (5) як чанд афзалиятҳо дорад. Аз ҷумла, дар асоси ин муодилаҳо ба таври умумию схемавӣ чанд хосиятҳои муҳими моеъҳоро баррасӣ намуда, баҳо додан мумкин аст. Масалан, дар рӯйдодҳои статсионарӣ $\frac{\partial \hat{J}_{m, tr}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} = 0$ ва аз (5) ифодаҳои (1) дар шакли умуми ҳосил мекунем $\hat{J}_{m, tr} = \tau_{m, tr, tr} \hat{A}_{m, tr} = -\tau_{m, tr, tr} M_{t, r, tr} \vec{\nabla}_{\vec{x}, \vec{\theta}} \hat{P}_m$, ки дар он $\tau_{m, tr, tr} M_{t, r, tr}$ коэффитсиенти интиқоли умумикардасуда мебошад.

Агар ифодаи (5a) - ро ба муодилаҳои (5) гузорем танҳо бо назардошти дараҷаҳои озои транслясионӣ барои Фурье-акси $\hat{P}_m$ муодилаи зеринро ҳосил мекунем

$$(1 + i\nu\tau_{mt}) \frac{\partial \hat{P}_m(\vec{x}, \nu)}{\partial t} = \tau_{mt} M_t \frac{\partial^2 \hat{P}_m(\vec{x}, \nu)}{\partial \vec{x}^2}. \quad (6)$$

Аз (6) ба осонӣ нишон додан мумкин аст, ки дар рӯйдодҳои динамикии пастбасомад ($\nu\tau_{mt} \rightarrow 0$) интиқоли бузургии $\hat{P}_m(\vec{x})$ бо қимати статсионари коэффисиенти интиқол $D_{mt} = \tau_{mt} M_t$ тавсиф шуда, муодилаи интиқоли (6) муодилаи дифференсиалии тартиби дуоми ҳосилаҳои хусусии навъи параболий $\frac{\partial \hat{P}_m(\vec{x})}{\partial t} = D_{mt} \frac{\partial^2 \hat{P}_m(\vec{x})}{\partial \vec{x}^2}$ ва механизми интиқол дифузионӣ мешавад.

Дар рӯйдодҳои динамикии баландбасомад ($\nu\tau_{mt} \rightarrow \infty$) ва муодилаи интиқоли (6) муодилаи дифференсиалии тартиби дуоми ҳосилаҳои хусусии навъи гиперболий мегардад: $\frac{\partial^2 \hat{P}_m(\vec{x})}{\partial t^2} = M_t \frac{\partial^2 \hat{P}_m(\vec{x})}{\partial \vec{x}^2}$, раванди интиқол бо қимати баландбасомади модули чандирӣ M_t тавсиф шуда, механизми интиқол мавҷӣ мешавад. Ин мисолҳо гувоҳи онанд, ки механизмҳои диффузионӣ-мавҷӣ дар муодилаҳои диссертатсия аз ибтидо вориданд.

Барои аз муодилаҳои намуди (4)-(6) ҳосил намудани муодилаҳои гидродинамикаи умумикардасишуда ва таҳқиқ намудани падидаҳои интиқолу релаксатсия дар моеъҳои асимметрӣ, қимати миёнаи статистикуи ин муодилаҳоро тавассути ансамбли статистикуи мувофиқ ёфтаи лозим аст. Аз ин лиҳоз, ифодаи умумии ФТГ - ро бо назардошти (6) тибқи чунин менависем:

$$f(t) = f_L + f_t, \quad (7)$$

дар инҷо f_L и f_t - қисмҳои локалӣ-мувозинатӣ ва ғайримувозинатӣ (осиллятсиякунанда)-и ФТГ мебошанд. Мувофиқи схемаи ҳангоми ёфтани қимати миёнаи статистикӣ, иҷроиши айниятҳои зерин зарур шуморида мешавад:

$$\langle \hat{P}_m \rangle_f = \langle \hat{P}_m \rangle_L; \langle \hat{A} \rangle_f = \langle \hat{A} \rangle_L; \langle \hat{I}_m \rangle_f = \langle \hat{I}_m \rangle_t; \langle \hat{I}_m \rangle_L = 0; \langle \frac{\partial \hat{P}_m}{\partial x} \rangle_f \approx \frac{\partial \langle \hat{P}_m \rangle_f}{\partial x}; \langle \frac{\partial \hat{P}_m}{\partial \theta} \rangle_f \approx \frac{\partial \langle \hat{P}_m \rangle_f}{\partial \theta};$$

$$\langle \frac{\partial \hat{P}_m}{\partial t} \rangle_f \approx \frac{\partial \langle \hat{P}_m \rangle_f}{\partial t}; \hat{P}_m > \frac{\partial \hat{P}_m}{\partial x}, \frac{\partial \langle \hat{A} \hat{P}_m \rangle}{\partial \theta}; F_m > \frac{\partial F_m}{\partial x}, \frac{\partial F_m}{\partial t}, \frac{\partial \hat{P}_m}{\partial t} \sim \frac{\hat{P}_m}{\tau_m} \gg \hat{P}_m.$$

Дар **фасли сеюм** системаи сарбастаи муодилаҳои таҳавулотӣ бузургҳои динамикуе, ки ҳолати ғайримувозинатии моеъро тавсиф медиҳанд сохта шудаанд. Дар амсилаи баррасишавандаи моеъҳо ду бузургии динамикуи бақодошта мавҷуданд: зичии динамикуи шумораи зарраҳо -

$$\hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_i) \quad (8a)$$

ва зичии динамикуи энергияи дохилӣ -

$$\hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta}) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{2I_{\alpha\beta}} + \sum_{j \neq i}^N \Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j) \right) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_i). \quad (8b)$$

Ифодаҳои (8) - ро нисбати вақт дифференсиронида занҷираи муодилаҳои таҳавулотӣ бузургҳои динамикуро, ки ҳолати ғайримувозинатии моеъро тавсиф мекунанд, ҳосил менамоем:

$$\frac{\partial \hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + \frac{\partial (j_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) + u^\alpha(\vec{x}, t) \hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta}))}{\partial x^\alpha} + \frac{\partial (a^{\alpha\beta} j_r^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) + \omega^\beta(\vec{x}, t) \hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta}))}{\partial \theta^\alpha} = 0,$$

$$\frac{\partial j_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + \hat{n}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{du^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x^\beta} \left(\hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) + m j_t^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) u^\alpha(\vec{x}, t) \right) +$$

$$+ \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial \theta^\beta} \left(a^{\beta\gamma} (\hat{P}_{tr}^{\alpha\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}) + m j_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) \omega^\gamma(\vec{x}, t)) \right) + j_t^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial u^\alpha(\vec{x}, t)}{\partial x^\beta} = \hat{I}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}),$$

$$\frac{\partial j_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + I_{\alpha\beta}^{-1} \frac{\partial}{\partial x^\gamma} \left(\hat{P}_{rt}^{\gamma\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) + I_{\beta\sigma} j_r^\sigma(\vec{x}, \vec{\theta}) u^\gamma(\vec{x}, t) \right) + \vec{n}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{d\omega^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} +$$

$$\begin{aligned}
& + J_t^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial \omega^\alpha(\vec{x}, t)}{\partial x^\gamma} + I_{\alpha\beta}^{-1} \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} \left(a^{\gamma\sigma} \left(\hat{P}_r^{\sigma\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) + I_{\beta\rho} \hat{f}_r^\rho(\vec{x}, \vec{\theta}) \omega^\sigma(\vec{x}, t) \right) \right) = \hat{I}_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}). \\
& \frac{\partial \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + m \hat{f}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{du^\beta(\vec{x}, t)}{dt} + m \hat{f}_t^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{du^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \frac{\partial \hat{S}_t^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial x^\gamma} + \\
& + \frac{\partial}{\partial x^\gamma} \left(u^\gamma(\vec{x}, t) \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} \left(a^{\gamma\sigma} \hat{S}_t^{\alpha\beta\sigma}(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} \left(a^{\gamma\sigma} \omega^\sigma(\vec{x}, t) \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) + \\
& + \hat{P}_t^{\alpha\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial u^\beta(\vec{x}, t)}{\partial x^\gamma} + \hat{P}_t^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial u^\alpha(\vec{x}, t)}{\partial x^\beta} = \hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \\
& \frac{\partial \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + I_{\alpha\lambda} \hat{f}_r^\lambda(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{du^\beta(\vec{x}, t)}{dt} + I_{\beta\rho} \hat{f}_t^\rho(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{d\omega^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \frac{\partial \hat{R}_t^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial x^\gamma} + \\
& + \frac{\partial}{\partial x^\gamma} \left(u^\gamma(\vec{x}, t) \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} \left(a^{\gamma\sigma} \hat{R}_t^{\alpha\beta\sigma}(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} \left(a^{\gamma\sigma} \omega^\sigma(\vec{x}, t) \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) + \\
& + \hat{P}_{rt}^{\alpha\lambda}(\vec{x}, \vec{\theta}) I_{\beta\rho} \frac{\partial \omega^\rho(\vec{x}, t)}{\partial x^\lambda} + \hat{P}_{rt}^{\alpha\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial u^\beta(\vec{x}, t)}{\partial x^\gamma} = \hat{I}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \\
& \frac{\partial \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + I_{\gamma\beta} \hat{f}_r^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{d\omega^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \hat{f}_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) I_{\gamma\beta} \frac{d\omega^\gamma(\vec{x}, t)}{dt} + \frac{\partial \hat{\pi}^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial}{\partial x^\gamma} \left(u^\gamma(\vec{x}, t) \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} \left(a^{\gamma\sigma} \pi_r^{\alpha\beta\sigma}(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} \left(a^{\gamma\sigma} \omega^\sigma(\vec{x}, t) \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) + \hat{P}_{tr}^{\beta\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial \omega^\alpha(\vec{x}, t)}{\partial x^\gamma} + \hat{P}_{rt}^{\alpha\gamma} \frac{I_{\beta\sigma}}{m} \frac{\partial \omega^\sigma(\vec{x}, t)}{\partial x^\gamma} = \\
& \hat{I}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}). \\
& \frac{\partial \hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial t} + m \hat{f}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{du^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + I_{\alpha\beta} \hat{f}_r^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{d\omega^\alpha(\vec{x}, t)}{dt} + \frac{\partial}{\partial x^\gamma} \left(u^\gamma(\vec{x}, t) \hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta}) + S_t^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) + \\
& + \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial u^\beta(\vec{x}, t)}{\partial x^\alpha} + \frac{\partial}{\partial \theta^\gamma} \left(a^{\gamma\beta} \left(\omega^\beta(\vec{x}, t) \hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta}) + \hat{S}_r^\beta(\vec{x}, \vec{\theta}) \right) \right) + \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \frac{\partial \omega^\beta(\vec{x}, t)}{\partial x^\alpha} = 0.
\end{aligned}$$

Инчо:

$$\begin{aligned}
\hat{f}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \frac{p_i^\alpha}{m} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_i); \\
\hat{f}_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \frac{\vec{M}_i^\beta}{I_{\alpha\beta}} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \delta(\vec{\theta} - \vec{\theta}_i); \\
\hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^\alpha p_i^\beta}{m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N F_{ij}^\alpha x_{ij}^\beta \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}); \\
\hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{I_{\beta\gamma}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N N_{ij}^{1\alpha} b_i^{\beta\gamma} \theta_{ij}^\gamma \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}); \\
\hat{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \frac{p_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{I_{\beta\gamma}} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}); \\
\hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{P}_i^\beta}{m} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}), \quad \hat{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) = \frac{m}{I_{\beta\gamma}} \cdot \hat{P}_{rt}^{\alpha\gamma}(\vec{x}, \vec{\theta}); \\
\hat{S}_t^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left\{ \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{2I_{\alpha\beta}} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i=1}^N \Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j) \right) \frac{p_i^\gamma}{m} + \right. \\
& + \frac{1}{4} \sum_{j \neq i=1}^N \left[F_{ij}^\alpha \frac{(p_i^\alpha + p_j^\alpha)}{m} x_{ij}^\gamma \right] \} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}), \\
\hat{S}_r^\gamma(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left\{ \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{\vec{M}_i^\alpha \vec{M}_i^\beta}{2I_{\alpha\beta}} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i=1}^N \Phi_{ij}(\vec{x}_{ij}, \vec{\theta}_i, \vec{\theta}_j) \right) I_{\gamma\sigma}^{-1} \vec{M}_i^\sigma + \right. \\
& + \frac{1}{4} \sum_{j \neq i=1}^N (N_{ij}^\alpha - [\vec{x}_{ij} \vec{F}_{ij}]^\alpha) I_{\alpha\sigma}^{-1} (\vec{M}_i^\sigma + \vec{M}_j^\sigma) b_i^{\gamma\rho} \theta_{ij}^\rho \} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta})
\end{aligned} \tag{10}$$

- зичии динамикии селҳои интиқоли: зарраҳо ($\hat{f}^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})$); импульс ва моменти импульс ($\hat{P}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})$); интиқоли энергия (гармӣ) ($\hat{S}^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})$) мебошанд, ки тавассути дараҷаҳои озоди пешравӣ (t), чархиш (r) ва ҳамтаъсиrotи онҳо (r,t) ҳосил шудаанд. Айнан:

$$\begin{aligned}
\hat{I}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \frac{\hat{F}^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta})}{m} = \frac{1}{m} \sum_{l=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N F_{ij}^\alpha \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) - \\
& - \frac{1}{m} \langle \sum_{l=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N F_{ij}^\alpha \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) \rangle_L; \\
\hat{I}_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \frac{\hat{N}^\beta(\vec{x}, \vec{\theta})}{I_{\alpha\beta}} = \frac{1}{I_{\alpha\beta}} \sum_{l=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N N_{ij}^\beta \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) - \\
& - \frac{1}{I_{\alpha\beta}} \langle \sum_{l=1}^N \sum_{j \neq i=1}^N N_{ij}^\beta \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) \rangle_L; \\
\hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \frac{1}{2m} \sum_{l=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(F_{ij}^\alpha P_{ij}^\beta + F_{ij}^\beta P_{ij}^\alpha \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) - \\
& - \frac{1}{2m} \langle \sum_{l=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(F_{ij}^\alpha P_{ij}^\beta + F_{ij}^\beta P_{ij}^\alpha \right) \delta(\vec{x}_i - \vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) \rangle_L;
\end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned}\hat{I}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= -\frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(F_{ij}^{\alpha} M_{ij}^{\beta} + N_{ij}^{\beta} P_{ij}^{\alpha} \right) \delta(\vec{x}_i, -\vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) - \\ &\quad - \frac{1}{2m} \langle \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(F_{ij}^{\alpha} M_{ij}^{\beta} + N_{ij}^{\beta} P_{ij}^{\alpha} \right) \delta(\vec{x}_i, -\vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) \rangle_L; \\ \hat{I}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) &= \frac{1}{2I_{\alpha\lambda}} \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(N_{ij}^{\lambda} M_{ij}^{\beta} + M_{ij}^{\lambda} N_{ij}^{\beta} \right) \delta(\vec{x}_i, -\vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) - \\ &\quad - \frac{1}{2I_{\alpha\lambda}} \langle \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j=1}^N \left(N_{ij}^{\lambda} M_{ij}^{\beta} + M_{ij}^{\lambda} N_{ij}^{\beta} \right) \delta(\vec{x}_i, -\vec{x}) \delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta}) \rangle_L.\end{aligned}$$

-манбаъҳои релаксационии тағйирёбии бузургҳои динамикии бебақо $\hat{f}^{\alpha}(\vec{x}, \vec{\theta})$ ва $\hat{P}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})$ – ро бо мурури вақт ифода менамоянд. Барои он ки системаи муодилаҳои (9) барои тензорҳои $\hat{P}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta})$ сарбаста шаванд, ифодаҳои тақрибии $\hat{S}^{\alpha\beta\gamma}$, $\hat{R}^{\alpha\beta\gamma}$, $\hat{\pi}^{\alpha\beta\gamma} \approx \frac{1}{5} (\hat{S}_t^{\alpha} \delta_{\beta\gamma} + \hat{S}_t^{\beta} \delta_{\alpha\gamma} + \hat{S}_t^{\gamma} \delta_{\alpha\beta})$ – ро истифода намудем.

Дар **фаслҳои чорум ва панҷуми боби дуюм**, дар асоси (7) бо назардошти (8)-(11) функсияи тақсимои статистикӣ локалӣ-мувозинатӣ (f_L) ва қисмати гаримувозинатии ФТҒ (f_t) таҳия карда шудаанд

$$f_L = f_0 \left[1 - \phi - d_t^{\alpha}(\vec{x}, t) \bar{J}_t^{\alpha}(t) - d_r^{\alpha}(\vec{x}, t) \bar{J}_r^{\alpha}(t) - \xi_t^{\alpha\beta}(x, t) \bar{P}_t^{\alpha\beta}(t) - \xi_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, t) \bar{P}_{tr}^{\alpha\beta}(t) - \xi_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, t) \bar{P}_r^{\alpha\beta}(t) - q_t^{\alpha}(\vec{x}, t) \bar{S}_t^{\alpha}(t) - q_r^{\alpha}(\vec{x}, t) \bar{S}_r^{\alpha}(t) \right], \quad (12)$$

$$f_t = f_0 (\phi^t - \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t_i} dt_1 [d_t^{\alpha}(\vec{x}, t + t_1) \frac{\bar{F}^{\alpha}(t_1)}{m} + d_r^{\alpha}(\vec{x}, t + t_1) I_{\alpha\beta}^{-1} \bar{N}^{\beta}(t_1) + \xi_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, t + t_1) \bar{I}_t^{\alpha\beta}(t_1) + \xi_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}, t + t_1) \bar{I}_{tr}^{\alpha\beta}(t_1) + \xi_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, t + t_1) \bar{I}_r^{\alpha\beta}(t_1) + q_t^{\alpha}(\vec{x}, t + t_1) \bar{K}_t^{\alpha}(t_1) + q_r^{\alpha}(x, t + t_1) \bar{K}_r^{\alpha}(t_1)]), \quad (13)$$

инҷо

$$f_0 = \frac{e^{-\beta(\vec{x}, t)(H - \mu(\vec{x}, t)N)}}{\int \dots \int e^{-\beta(\vec{x}, t)(H(t) - \mu(\vec{x}, t)N)} d\Gamma} \quad (14)$$

- функсияи тақсимои локалӣ-мувозинатии Гиббс мебошад. Ифодаҳои ϕ и ϕ^t дар диссертатсия оварда шудаанд.

Дар асоси шарт $\langle \hat{P}_m \rangle_f = \langle \hat{P}_m \rangle_L$ ва сарфи назар намудани вобастагии интиқоли масса, импульс ва гармӣ аз якдигар барои параметрҳои макроскопии номаълуми дар (12) ва (13) дохилшаванда ифодаҳои зерин

$$\begin{aligned}d_t^{\beta} &= \frac{J_t^{\alpha}}{\langle J_t^{\alpha} J_t^{\beta}(t) \rangle_0}; \quad d_r^{\beta} = \frac{J_r^{\alpha}}{\langle J_r^{\alpha} J_r^{\beta}(t) \rangle_0}; \quad q_t^{\beta} = \frac{S_t^{\alpha}}{\langle S_t^{\alpha} S_t^{\beta}(t) \rangle_0}; \quad q_r^{\beta} = \frac{S_r^{\alpha}}{\langle S_r^{\alpha} S_r^{\beta}(t) \rangle_0}; \\ \xi_{t\sigma}^{\gamma\sigma} &= \frac{-\bar{P}_t^{\alpha\beta}}{\langle \bar{P}_t^{\alpha\beta} \bar{P}_t^{\gamma\sigma}(t) \rangle_0}; \quad \xi_r^{\gamma\sigma} = \frac{-\bar{P}_r^{\alpha\beta}}{\langle \bar{P}_r^{\alpha\beta} \bar{P}_r^{\gamma\sigma}(t) \rangle_0}; \quad \xi_{tr}^{\gamma\sigma} = \frac{-\bar{P}_{tr}^{\alpha\beta}}{\langle \bar{P}_{tr}^{\alpha\beta} \bar{P}_{tr}^{\gamma\sigma}(t) \rangle_0}.\end{aligned} \quad (15)$$

ёфта шудаанд. Ифодаи (7) бо назардошти ифодаҳои (12), (13), (15) ва шарт; $\hat{P}_m \ll \frac{\partial \hat{P}_m}{\partial t}$, метавонад дар шакли умумитару сода навишта шавад

$$f(t) = f_L \left\{ 1 - \phi^t - \sum_m \iint d\vec{x} d\vec{\theta} \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t_1} \left(F_m(\vec{x}, t + t_1) \bar{I}_m(\vec{x}, \vec{\theta}, t_1) \right) dt_1 \right\}. \quad (16)$$

Дар фасли якум ва дуҷуми **боби се**, тавассути истифодаи ФТҒ (16) аз системаи муодилаҳои системаи муодилаҳои (7) - (11), системаи сарбастаи муодилаҳои гидродинамикаӣ умумикардасуда барои вектори сели масса (J^{α}) ва тензори шиддат ($\sigma^{\alpha\beta}$) ёфта шудаанд.

$$\sigma^{\alpha\beta} = -P^{\alpha\beta} + P \delta^{\alpha\beta} \quad (17)$$

$$\frac{\partial J_t^{\alpha}}{\partial t} = A_t^{\alpha} + I_t^{\alpha}; \quad \frac{\partial J_r^{\alpha}}{\partial t} = A_r^{\alpha} + I_r^{\alpha} \quad (18)$$

$$\frac{\partial \sigma_t^{\alpha\beta}}{\partial t} + A_t^{\alpha\beta} = I_t^{\alpha\beta}; \quad \frac{\partial \sigma_r^{\alpha\beta}}{\partial t} + A_r^{\alpha\beta} = I_r^{\alpha\beta}; \quad \frac{\partial \sigma_{tr}^{\alpha\beta}}{\partial t} = I_{tr}^{\alpha\beta}, \quad (19)$$

инҷо

$$\begin{aligned}A_t^{\alpha} &= -n \frac{du^{\alpha}}{dt} - M_t^D \frac{\partial n}{\partial x^{\alpha}} - M_t^{TD} \frac{\partial T}{\partial x^{\alpha}}; \quad A_r^{\alpha} = -n \frac{d\omega^{\alpha}}{dt} - M_r^D \frac{\partial}{\partial \theta^{\gamma}} (a^{\alpha\gamma} n) - M_r^{TD} \frac{\partial}{\partial \theta^{\gamma}} (a^{\alpha\gamma} T); \\ A_t^{\alpha\beta} &= -\mu_t^s \left\{ \frac{\partial u^{\alpha}}{\partial x^{\beta}} \right\} - \mu_t^t \nu \delta^{\alpha\beta} \left(\frac{\partial u^{\gamma}}{\partial x^{\gamma}} \right) - \mu_{bv}^t \delta^{\alpha\beta} \frac{\partial (a^{\gamma\rho} \omega^{\rho})}{\partial \theta^{\gamma}} - \mu_{bs}^t \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (rot \vec{u})^{\gamma}\end{aligned} \quad (20)$$

$$A_r^{\alpha\beta} = -\mu_{ts}^r \left\{ \frac{\partial u^\alpha}{\partial x^\beta} \right\} - \mu_{tv}^r \delta^{\alpha\beta} \left\{ \frac{\partial u^\gamma}{\partial x^\gamma} \right\} - \mu_{rv}^r \delta^{\alpha\beta} \frac{\partial (a^{\gamma\rho} \omega^\rho)}{\partial \theta^\gamma} - \mu_{bs}^r \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (rot \vec{u})^\gamma.$$

- манбаъҳои гидродинамикии мувофиқ ва

$$\begin{aligned} M_t^D &= \frac{1}{m} \left(\frac{\partial P_t}{\partial n} \right)_T; \quad M_t^{TD} = \frac{1}{m} \left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_n; \quad M_r^D = \frac{1}{l} \left(\frac{\partial P_r}{\partial n} \right)_T; \quad M_r^{TD} = \frac{1}{l} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_n \\ \mu_{ts}^t &= \left[P_t - \frac{P_t}{c_v} \left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_n \right]; \quad \mu_{tv}^t = \left[\frac{5}{2} P_t - n \left(\frac{\partial P_t}{\partial n} \right)_T - \frac{(e+P_t)}{c_v} \left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_n \right]; \\ \mu_{ts}^t &= \frac{1}{2} \frac{P_t}{c_v} \left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_n; \quad \mu_{rv}^t = \left[P_t - n \left(\frac{\partial P_t}{\partial n} \right)_T - \frac{e}{c_v} \left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_n \right] \\ \mu_{ts}^r &= \frac{P_t}{c_v} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_n; \quad \mu_{tv}^r = \left[P_r - n \left(\frac{\partial P_r}{\partial n} \right)_T - \frac{(e+P_t)}{c_v} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_n \right] \\ \mu_{rs}^r &= \frac{1}{2} \frac{P_r}{c_v} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_n; \quad \mu_{rv}^r = \left[P_r - n \left(\frac{\partial P_r}{\partial n} \right)_T + \frac{e}{c_v} \left(\frac{\partial P_r}{\partial T} \right)_n \right] \end{aligned} \quad (21)$$

- модулиҳои диффузионӣ (M^D), термодиффузионӣ (M^{TD}), ғеҷиш (μ_s), ҳаҷми (μ_v) чандирии моеъҳо, ки бо саҳми дараҷаҳои озоди пешравӣ (t), чархиш (r) ва ҳамтаъсири онҳо (tr) муайян карда мешаванд.

Қиматҳои ба (21) дохилшудаи зичии энергияи дохилӣ e , фишорҳо P_t, P_r ва ҳосилаҳоиашон аз муодилаҳои калорикии термикии ҳолат

$$e(T, n) = \langle \hat{H}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_o = 3nk_B T + \frac{n^2}{2} \int \Phi_{ij}(x_{ij}) g_o(x_{ij}, \theta_{ij}) d\vec{x}_{ij} \quad (22a)$$

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} P_t(T, n) \\ P_r(T, n) \end{aligned} \right\} &= \frac{1}{3} \left\{ \langle \hat{P}_t^{\alpha\alpha}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_o \right\} = nk_B T - \\ &\frac{n^2}{6} \int \left\{ \frac{\partial \Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_{ij})}{\partial x_{ij}} x_{ij} \right\} g_o(x_{ij}, \theta_{ij}) d\vec{x}_{ij} d\vec{\theta}_{ij}, \end{aligned} \quad (22b)$$

муайян карда шуда метавонанд.

Мувофиқи (20) – (22) масъалаҳои таҳқиқи хосиятҳои гармофизикӣ ва чандирии ғайримувозинатии моеъҳо ба масъалаи муайянкунӣ (интиҳоб)-и потенциали таъсири байнимолекулавии молекулаҳо $\Phi_{ij}(x_{ij}, \theta_{ij})$ ва функсияи тақсимои радиалии мувозинатии молекулаҳо $g_o(x_{ij}, \theta_{ij})$ оварда шудаанд. Қайд ҷоиз аст, ки агар ифодаҳои (21)-ро ба вақтҳои релаксатсия зарб занем, ифодаҳои қиматҳои статсионари коэффитсиентҳои интиқоли ба ин модулиҳои чандирий мувофиқро меёбем.

Дар **фасли сеюми боби се** дар доираи ФТҒ (16) манбаҳои релаксатсионии системаи муодилаҳои (18)-(19) муайян карда шудаанд:

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_t &= \frac{F^\alpha}{m} = -B_t^{\alpha\beta} J_t^\beta - B_{tr}^{\alpha\beta} J_r^\beta; \quad \langle \hat{I}_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_t = \frac{N^\alpha}{l} = -B_r^{\alpha\beta} J_r^\beta - B_{rt}^{\alpha\beta} J_t^\beta \\ \langle \hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_t &= -B_{tt}^{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_t^{\gamma\rho} - B_{ttr}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_{tr}^{\gamma\rho}; \quad \langle \hat{I}_r^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_t = -B_{rtr}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_{tr}^{\gamma\rho} - B_{rr}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_r^{\gamma\rho}; \\ \langle \hat{I}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle_t &= -B_{trtr}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_{tr}^{\gamma\rho} - B_{trr}^{\alpha\beta\gamma\rho} \sigma_r^{\gamma\rho}. \end{aligned} \quad (23)$$

Коэффитсиентҳои В-и дар (23) андозаи баръакси вақтро доранд ва вақтҳои релаксатсияи мувофиқ ($B^{-1} = \tau$) ро ифода мекунанд, ки тензорҳои мураккаби дараҷаҳои дуум ва чорум мебошанд. Аз ҷумла, дар шакли содакардашудааш ҳам $B_{tt}^{\alpha\beta\gamma\rho} = \frac{\int_0^t \langle \hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{\theta}) \hat{I}_t^{\gamma\mu}(t') \rangle_o dt'}{\langle \hat{P}_t^{\mu\nu}(\vec{x}, \vec{\theta}) \hat{P}_t^{\gamma\sigma}(t) \rangle_o}$, хеле мураккаб мебошад.

Таҳлили муфассали релаксатсияҳои дохили термикӣ гузаронида шуда, нишон дода шудааст, ки ҳамаи вақтҳои хоси релаксатсияи дар (23) дохилшаванда ба воситаи се вақти асосии хоси релаксатсияҳои: транслясионӣ τ_t ; чархишӣ τ_r ; ва байнихамдигарӣ τ_{tr} ба таври зерин ифода карда мешаванд:

$$\tau_{tt} = \frac{5}{3}\tau_t; \tau_{rr} = \frac{5}{3}\tau_r; \tau_{tr} = \tau_{tr} = 2\sqrt{\frac{m}{I}}\tau_{tr}; \tau_{tr} = \tau_{tr} = \frac{10}{3}\sqrt{\frac{I}{m}}\tau_{tr}; \tau_{tr} = \frac{4\tau_t\tau_r}{\tau_t + \tau_r},$$

дар ин чо

$$\tau_t = \frac{m}{\beta_t} = \frac{3mk_6T}{\int_0^t dt' \langle F(0)F(t') \rangle_0}; \tau_r = \frac{m}{\beta_r} = \frac{3Ik_6T}{\int_0^t dt' \langle N(0)N(t') \rangle_0}; \tau_{tr} = \frac{\sqrt{Im}}{\beta_{tr}} = \frac{3\sqrt{mIk_6T}}{\int_0^t dt' \langle F(0)N(t') \rangle_0}. \quad (24)$$

Мувофиқи (24), вақтҳои хоси релаксатсия ба воситаи корреляторҳои мувозинатӣ $\langle F(0)F(t') \rangle_0$, $\langle N(0)N(t') \rangle_0$, $\langle F(0)N(t') \rangle_0$ ифода карда мешаванд. Ин маънои онро дорад, ки дар фосилаи байни даккаҳуриҳо аз тарафи молекулаҳои ҳамсоя ба молекулаҳо қувваҳои тасодуфӣ $F(t')$ ва моменти қувваҳои тасодуфӣ $N(t')$, таъсир мекунанд, ки ҳаракатҳои пешраванда ва чархиши онҳоро “соишнок” мекунанд. Дар натиҷа, диссипатсияи энергия ба амал омада барнагардандагии рӯйдодҳои интиқоли ба вучуд меояд, ки онро тавассути вақтҳои хоси релаксатсияи мувофиқ ба назар мегиранд.

Ифодаи (23)-ро бо назардошти (24) ба (18) - (19) гузошта, системаҳои сарбастаи муодилаҳои гидродинамикаи умумикардасҳударо барои векторҳои сели интиқоли масса J^α ва тензорҳои шиддат $\sigma^{\alpha\beta}$, ки бо саҳми дараҷаҳои озодии пешравӣ (t), чархиш

(r) ва ҳамтаъсироти онҳо (tr) ҳосил мешаванд, меёбем

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_t^\alpha}{\partial t} + \frac{J_t^\alpha}{\tau_t} + \sqrt{\frac{I}{m}} \frac{J_r^\alpha}{\tau_{tr}} &= A_t^\alpha; \quad \frac{\partial J_r^\alpha}{\partial t} + \sqrt{\frac{m}{I}} \frac{J_t^\alpha}{\tau_{tr}} + \frac{J_r^\alpha}{\tau_r} = A_r^\alpha; \\ \frac{\partial \sigma_t^{\alpha\beta}}{\partial t} + \frac{\sigma_t^{\alpha\beta}}{\tau_{tt}} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{I}{m}} \frac{\sigma_{tr}^{\alpha\beta}}{\tau_{tr}} &= A_t^{\alpha\beta}; \quad \frac{\partial \sigma_r^{\alpha\beta}}{\partial t} + \frac{\sigma_r^{\alpha\beta}}{\tau_{rr}} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{I}{m}} \frac{\sigma_{tr}^{\alpha\beta}}{\tau_{tr}} = A_r^{\alpha\beta}; \\ \frac{\partial \sigma_{tr}^{\alpha\beta}}{\partial t} + \frac{\sigma_{tr}^{\alpha\beta}}{\tau_{tr}} + \frac{3}{10} \sqrt{\frac{m}{I}} \frac{\sigma_r^{\alpha\beta}}{\tau_{tr}} + \frac{3}{10} \sqrt{\frac{m}{I}} \frac{\sigma_t^{\alpha\beta}}{\tau_{tr}} &= 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Системаи муодилаҳои (25) системаи асосии муодилаҳои гидродинамикаи умумикардасҳуда барои таҳқиқи падидаҳои динамикии интиқоли масса, импульс ва моменти импульс дар моеъҳои мураккаби асимметрий, ки аз молекулаҳои саҳти шаклашон дилҳоқ иборатанд, мебошад. Барои истифодаи амалӣ, дар шакли Фуре-акс навиштани (25) қулайтар аст

$$J_t^\alpha (1 + i\nu\tau_t) + \sqrt{\frac{I}{m}} \frac{\tau_t}{\tau_{tr}} J_r^\alpha = \tau_t A_t^\alpha; \quad J_r^\alpha (1 + i\nu\tau_r) + \sqrt{\frac{m}{I}} \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} J_t^\alpha = \tau_r A_r^\alpha; \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \sigma_t^{\alpha\beta} (1 + i\nu\tau_{tt}) + \frac{1}{2} \frac{\tau_{tt}}{\tau_{tr}} \sqrt{\frac{I}{m}} \sigma_{tr}^{\alpha\beta} &= \tau_{tt} A_t^{\alpha\beta}; \quad \sigma_r^{\alpha\beta} (1 + i\nu\tau_{rr}) + \frac{1}{2} \frac{\tau_{rr}}{\tau_{tr}} \sqrt{\frac{I}{m}} \sigma_{tr}^{\alpha\beta} = \tau_{rr} A_r^{\alpha\beta} \\ \sigma_{tr}^{\alpha\beta} (1 + i\nu\tau_{tr}) + \frac{3}{10} \sqrt{\frac{m}{I}} \frac{\tau_{tr}}{\tau_{tr}} (\sigma_t^{\mu\nu} + \sigma_r^{\mu\nu}) &= 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Манбаҳои гидродинамикӣ дар (25)-(27) бо ифодаҳои (20) муайян карда мешаванд.

Дар **фасли чоруми боби сеюм** нишон дода шудааст, ки муодилаҳои ҳосилшуда умумитар буда, натиҷаҳои дар адабиёт маълумро дар бар мегиранд. Аз ҷумла, бо ҳалли муодилаҳои содакардасҳударо (23) нисбати векторҳои сели интиқоли масса, ифодаи зерин ҳосил карда шудааст:

$$\begin{aligned} J_t^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t) &= \Delta_t F^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t) - \Delta_{tr} N^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t) \\ J_r^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t) &= \Delta_r N^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t) - \Delta_{rt} F^\alpha(\vec{x}, \vec{\theta}, t), \text{ где} \end{aligned} \quad (28)$$

дар инчо

$$\Delta_t = \frac{\beta_r}{\beta_t \beta_r - (\beta_{tr})^2} \Delta_r = \frac{\beta_t}{\beta_t \beta_r - (\beta_{tr})^2}; \quad \Delta_{tr} = \frac{\beta_{tr}}{\beta_t \beta_r - (\beta_{tr})^2}; \quad \Delta_{tr} = \Delta_{rt}$$

коэффитсиентҳои мувофиқи ҳаракатпазирии молекулаҳои моеъ мебошанд. Аз (28) бармеояд, ки таъсири мутақобили байни дараҷаҳои озод бузургии сели

интиқоли массаро, тавассути дараҷаҳои пешравӣ ва ҷархиш кам мекунамд. Ҳангоми ба назар нагирифтани таъсири байнихамдигарии дараҷаҳои озод ($\beta_{tr} = 0$), интиқоли масса тавассути дараҷаҳои озодии пешравӣ ва ҷархиш бо коэффитсиентҳои ҳаракатпазирии $\Delta_t = \frac{1}{\beta_t}$ и $\Delta_r = \frac{1}{\beta_r}$ новобаста аз якдигар ба амал меоянд. Агар коэффитсиентҳои ҳаракатпазириро бо $k_B T$ зарб занем, ифодаҳои маълуми коэффитсиентҳои диффузияи транслясионӣ ва ҷархиш ($D_t = \frac{k_B T}{\beta_t}$ и $D_r = \frac{k_B T}{\beta_r}$) -ро ҳосил мекунем. Чунин мисолҳо аз хосиятҳои часпакию чандирии моеъҳо низ оварда шудаанд.

Дар боби чорум, муодилаҳои гидродинамикаи умумикардашудае, ки бо назардошти сохтори моеъҳои дар онҳо мубодилаи энергия дар байни дараҷаҳои озодии якхела нисбат ба мубодилаи энергия дар байни дараҷаҳои озодии гуногун тезтар сурат мегирад (шарти $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$ иҷро мешавад), содакардашудае, ки дар онҳо

релаксатсияҳои транслясионӣ нақши асосӣ мебозанд

$$J_t^\alpha(\nu) = \frac{\tau_t}{(1+i\nu\tau_t)} A_t^\alpha(\nu); \quad \sigma_t^{\alpha\beta}(\nu) = \frac{\tau_{tt}}{(1+i\nu\tau_{tt})} A_t^{\alpha\beta}(\nu); \quad (29)$$

барои таҳқиқи падидаҳои интиқоли масса ва импульс дар моеъҳои содаи аз молекулаҳои курашакли чандир иборат истифода шудаанд.

Дар **фасли сеюм** дар асоси ифодаҳои (20), (21) ва (29) барои коэффитсиентҳои динамикии интиқоли масса ва модулҳои динамикии чандирии бо онҳо мувофиқи моеъҳои якатома формулаҳои зерин ёфта шудаанд:

$$\Delta_t(\nu) = \frac{\tau_t M_t^A}{(1+(\nu\tau_t)^2)}, \quad D_t(\nu) = \frac{\tau_t M_t^D}{(1+(\nu\tau_t)^2)}, \quad D_t^T(\nu) = \frac{\tau_t M_t^{TD}}{(1+(\nu\tau_t)^2)_n} \quad (30)$$

$$M_t^A(\nu) = \frac{M_t^A (\nu\tau_t)^2}{(1+(\nu\tau_t)^2)}, \quad M_t^D(\nu) = \frac{M_t^D (\nu\tau_t)^2}{(1+(\nu\tau_t)^2)}, \quad M_t^{TD}(\nu) = \frac{M_t^{TD} (\nu\tau_t)^2}{(1+(\nu\tau_t)^2)}, \quad (31)$$

Ҳамаи параметрҳои ба ин ифодаҳо дохилшаванда маълуманд (ниг. ба (21)) ва барои ҳисобкунии ададӣ онҳоро дар шакли беандоза навиштан қулай аст:

$$\beta_t = B_3 \frac{\tilde{n}}{\tilde{T}} \int_0^\infty \left(\frac{\partial \tilde{\Phi}(r)}{\partial r} \right)^2 g_0(r) r^2 dr, \quad B_3 = 4 \frac{\epsilon \tau}{\sigma^2}. \quad (32)$$

$$P_t(T, n) = B_o \tilde{n} \tilde{T} \left(1 - 4 \frac{\tilde{n}}{\tilde{T}} \int_0^\infty \frac{\partial \tilde{\Phi}(r)}{\partial r} g_0(r) r^3 dr \right), \quad B_o = \frac{6\epsilon}{\pi \sigma^3}; \quad (33)$$

$$\left(\frac{\partial P_t(T, n)}{\partial n} \right)_T = B_1 \left(\tilde{T} - \frac{4\tilde{n}}{3} \int \frac{\partial \tilde{\Phi}(r)}{\partial r} g_0(r) r^3 dr \right), \quad B_1 = \epsilon \quad (34a)$$

$$\left(\frac{\partial P_t(T, n)}{\partial T} \right)_n = B_2 \left(\tilde{n} - \frac{2}{3} \left(\frac{\tilde{n}}{\tilde{T}} \right)^2 \int \frac{\partial (\tilde{\Phi}(r))^2}{\partial r} g_0(r) r^3 dr \right), \quad B_2 = \frac{6k_B}{\pi \sigma^3}. \quad (34b)$$

Барои муайянкунии $\tilde{\Phi}(r)$ и $g_0(r)$ ифодаҳо аз [31-М] истифода шудаанд:

$$\tilde{\Phi}(r) = \begin{cases} \infty, & \text{если } r \leq 1; \\ \left(\frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^6} \right), & \text{если } 1 < r < \infty. \end{cases} \quad (35)$$

$$g_o(r) = \begin{cases} \frac{2-\tilde{\rho}}{2(1-\tilde{\rho})^3}, & r \leq 1 \\ e^{-\frac{\tilde{\Phi}(r)}{\tilde{T}}} y(r) & 1 \leq r \leq 2 \\ e^{-\frac{\tilde{\Phi}(r)}{\tilde{T}}} & r > 2, \end{cases} \quad (36)$$

Дар ин ҷо $y(r)$ - функцияи бинарии тақсимои ду ковоқӣ мебошад, ки намуди ошқори он дар фосилаҳои $1 < r < 2$ дар [31-М] нишон дода шудааст.

Дар **фасли чорум**, бо истифода аз қиматҳои параметрҳои молекулавии аргони моеъ: $m = 66.341 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$, $\sigma = 3.405 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $\epsilon = 6,612 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$, қиматҳои

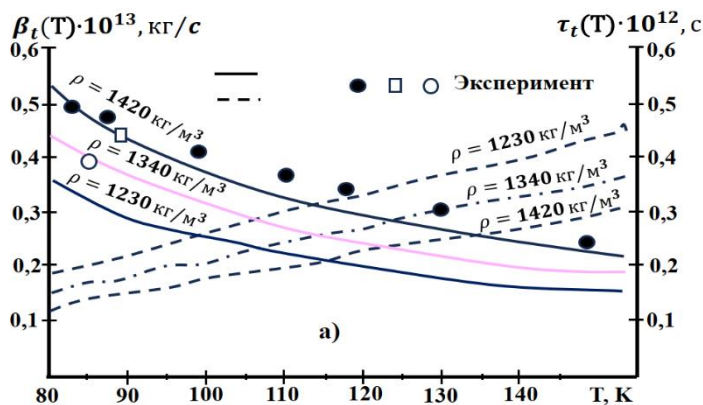
параметрҳои интиқоли масса ҳисоб карда шудаанд. Дар ҷадвали 1 натиҷаҳои ҳисобкунии адабии вобастагии коэффитсиенти соиши дохилии аргони моеъ β_t аз температура ва зичӣ тибқи формулаи (32) оварда шудаанд.

Ҷадвали 1. Натиҷаҳои ҳисобкунии адабии вобастагии коэффитсиенти соиши дохилии аргони моеъ ($\beta_t \cdot 10^{13}, \frac{\text{кг}}{\text{с}}$) аз температура ва зичӣ

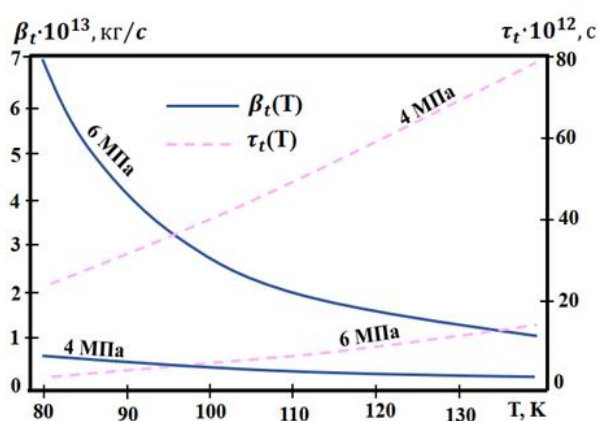
T, K	Зичӣ $\rho, \text{кг/м}^3$								Таҷриба
	1402	1377	1312	1240	1160	1065	1031	968	
86	4,8726	4,7218	4,3538	3,9813	3,6038	3,1966	3,0601	2,8185	
90	4,8318	4,6753	4,2951	3,9127	3,5278	3,1158	2,9785	2,7363	5.0100
100	4,7733	4,6045	4,1974	3,7927	3,3907	2,9666	2,8268	2,5823	
110	4,7572	4,5778	4,1474	3,7232	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	3.130
130	4,7941	4,5972	4,1276	3,6695	3,2239	2,7654	2,6170	2,3611	2,940
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	

Афзоиши $\beta_t(\rho)$ бо зиёдшавии зичӣ ва камшавии $\beta_t(T)$ бо афзоиши температура ба табиати ин бузургҳо дар моеъҳо мувофиқат мекунад. Вобастагии сусттари $\beta_t(T)$ ҳангоми доимӣ будани зичӣ (қимати сутунҳо) нисбати қимати $\beta_t(T)$ ҳангоми қиматҳои таҷрибавӣ мувофиқашудаи зичию температура (ҚТМ) (қиматҳои диагональ) ба нақши муайянкунанда доштани таъсири мутақобилаи молекулаҳо дар ташаккули вобастагии параметрҳои интиқол аз температура дар моеъҳо ишора мекунад (механизми Бачинский).

Дар расми 1 вобастагии $\beta_t(T)$ тибқи ҷадвали 1 ва вобастагии $\tau_t(T)$ тибқи ифодаи $\tau_t = \frac{m}{\beta_t}$ барои се қимати зичӣ оварда шудаанд [13-А]. Барои



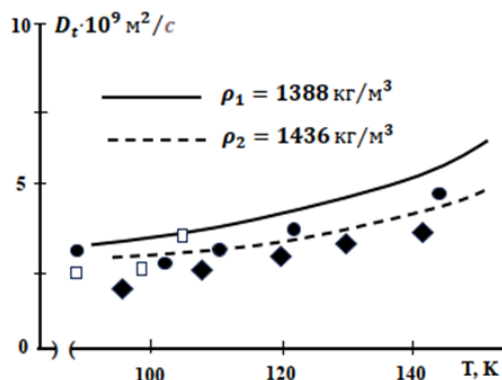
Расми 1. Вобастагии коэффитсиенти соиши дохилӣ β_t - хатҳои яқлухт ва вақти релаксатсияи транслясионӣ τ_t - хатҳои раҳнадор аз температура барои аргони моеъ: дар се қимати зичӣ.



Расми 2. Вобастагии коэффитсиенти соиши дохилӣ (β_t) ва вақти релаксатсияи транслясионӣ (τ_t) аз температура барои аргони моеъ, дар фишорҳои: $40 \cdot 10^5 \text{ Па}$ и $60,5 \cdot 10^5 \text{ Па}$.

санҷиши асоснокии фарзия дар бораи нақши муайянкунандаи таъсири мутақобилаи молекулаҳо дар ташаккули табиати вобастагии параметрҳои интиқол аз температура дар ифодаҳои β_t ва τ_t аз тағйирёбандаҳои (T, ρ) ба тағйирёбандаҳои (T, P) гузаштем. Чи хеле, ки аз расми 2 дида мешавад, дар ин маврид натиҷаҳои ҳисобкунии адабии $\beta_t(T)$ ва $\tau_t(T)$ барои ду қимати фишор

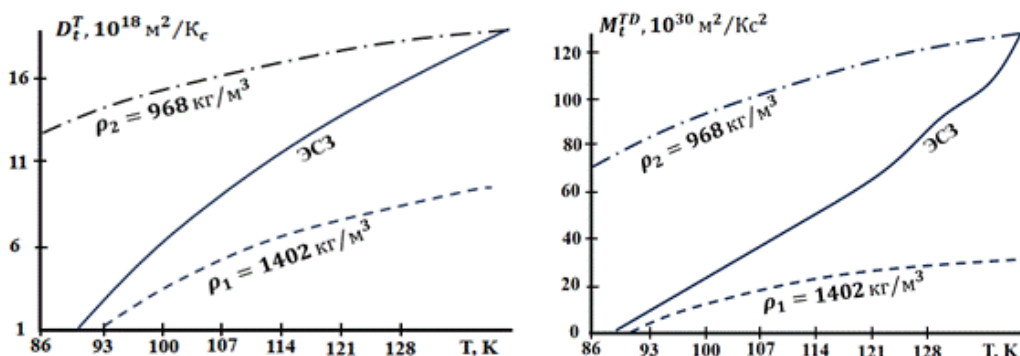
вобастагии мунтазами ин бузургихоро аз температура дар тамоми соҳаи тағйирёбии температура нишон медиҳад. Аз натиҷаҳои овардашуда бармеояд, ки ифодаҳои аналитикии барои β_t ва τ_t ҳосил кардашуда вобастагии табиати параметрҳои динамикии интиқолро аз температура, масусан дар соҳаи фишорҳои баланд дуруст инъикос менамоянд. Мувофиқати натиҷаҳои назариявӣ бо ҳамдигар ва бо маълумоти таҷрибавӣ ба дурустӣ ва асоснокии физикии амсилаҳои ибтидоии истифодашуда ва ифодаҳои аналитикии ёфташуда далолат мекунад.



Расми 3. Натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии коэффитсиенти диффузияи аргони моеъ аз температура дар ду қимати зичӣ.

Акнун бо истифода аз қиматҳои $\beta_t(T)$ ва $\tau_t(T)$ қонуниятҳои вобастагии параметрҳои интиқоли масса ва импульсро дар моеъҳои содаи якатома ҳисоб кардан мумкин аст. Масалан, дар расми 3 натиҷаҳои ҳисобкунии ададии вобастагии қиматҳои пастбасомади коэффитсиенти диффузия аз температура барои ду қимати зичӣ аз рӯи ифодаи $D_t = \tau_t M_t^D = \frac{1}{\beta_t} \left(\frac{\partial p_t}{\partial n} \right)_T$ бо назардошти (34), оварда шудаанд. Дар инҷо $\bullet, \blacklozenge, \square$ - натиҷаҳои таҷрибавӣ мебошанд. Дар расми 3 мувофиқати сифатан беҳтари натиҷаҳои таҷрибавию назариявӣ дар

зичиҳои калонтар ба назар мерасад. Якхелагии табиати вобастагии коэффитсиентҳои интиқол ва модулҳои чандирӣ аз температура, ки дар расми 4 дида мешавад, дар бораи муайянкунанда будани сохтори моеъ дар ташаккули табиати вобастагии параметрҳои интиқол аз бузургихои термодинамикии ҳолат, ишорат мекунад.



Расми 4. Вобастагии қиматҳои пастбасомади коэффитсиенти термодиффузияи (D_t^T) ва қиматҳои баландбасомади модули чандирии термодиффузиони (M_t^{TD}) аргони моеъ аз температура дар ду қимати зичӣ ва КТМ.

Дар фасли чорум, тавассути муайян кардани қисмҳои ҳақиқӣ ва мавҳумии муодилаи дуҷуми (29) бо назардошти (20), барои коэффитсиентҳои динамикии часпакии лағжиш $\eta_s(v)$ ва ҳаҷмӣ $\eta_v(v)$, инчунин барои модулҳои чандирии динамикии ба онҳо мувофиқ $\mu_s(v)$ и $\mu_v(v)$, ифодаҳои зерин ҳосил карда шудаанд:

$$\eta_{s\,tt} = \frac{\mu_{s\,tt}(\infty)\tau_{tt}}{1+(\nu\tau_{tt})^2}; \quad \eta_{v\,tt} = \frac{\mu_{v\,tt}(\infty)\tau_{tt}}{1+(\nu\tau_{tt})^2}; \quad \mu_{s\,tt} = \frac{\mu_{s\,tt}(\infty)(\nu\tau_{tt})^2}{1+(\nu\tau_{tt})^2}; \quad \mu_{v\,tt} = \frac{\mu_{v\,tt}(\infty)(\nu\tau_{tt})^2}{1+(\nu\tau_{tt})^2}, \quad (37)$$

Қиматҳои ҳамаи параметрҳои дар (37) дохилшаванда барои аргони моеъ дар параграфи гузашта муайян карда шудаанд. Натиҷаҳои ҳисобкуниҳои ададии вобастагии қиматҳои пастбасомади часпакии лағжиши аргони моеъ аз температура ва зичӣ дар ҷадвали 2 оварда шудаанд.

Ҷадвали 2. Ҳисобкунии ададии вобастагии қиматҳои пастбасомади часпакии лағжиши аргони моеъ аз температура ва зичӣ.

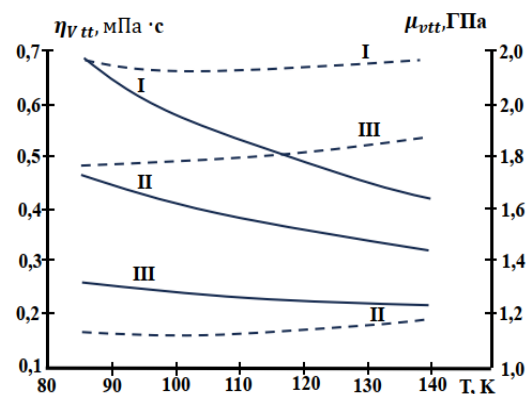
ρ , T, K	1402 кг/м ³	1377 кг/м ³	1312 кг/м ³	1240 кг/м ³	1160 кг/м ³	1065 кг/м ³	1031 кг/м ³	968 кг/м ³	Таҷр
86	0,2725	0,2576	0,2215	0,1857	0,1508	0,1154	0,1042	0,0853	0,272
90	0,2605	0,2467	0,2131	0,1797	0,1468	0,1132	0,1025	0,0844	0,245
100	0,2347	0,2231	0,1948	0,1661	0,1375	0,1079	0,0983	0,0821	0,199
110	0,2136	0,2038	0,1794	0,1545	0,1294	0,1030	0,0944	0,0797	0,155
120	0,1962	0,1877	0,1664	0,1445	0,1222	0,0985	0,0908	0,0774	0,123
130	0,1816	0,1741	0,1554	0,1359	0,1159	0,0945	0,0874	0,0752	0,092
135	0,1752	0,1681	0,1504	0,1320	0,1130	0,0926	0,0859	0,0742	0,079
140	0,1692	0,1626	0,1459	0,1284	0,1103	0,0908	0,0844	0,0731	0,073

Дар ҷадвал мувофиқати хуби натиҷаҳои ҳисобкунӣ дар ҚТМ бо маълумоти таҷрибавӣ ба назар мерасад. Қариб ҳамин гуна вобастагӣ ба часпакии ҳаҷмӣ низ хос аст (нигаред ба расми 5)

Қиматҳои изоҳории $\eta_{vt}(T)$ дар зичиҳои паст сустрар кам мешаванд ва дар температураҳои баланд, мисли часпакии газҳо, тамоюл ба афзоиш доранд. Ин мисолҳо бори дигар ба асоснокии фарзия дар бораи бартарии механизми газӣ дар ҳароратҳои баланд, ҳангоми доимӣ будани зичӣ ишора мекунад. Адҳамов А.А. нишон дода буд, ки дар мавриди доимӣ будани зичӣ дар температураҳои баланд часпакии моеъҳо чун часпакии газҳо бо баландшавии температура ҳамчун $\sqrt{T}$ меафзояд.

Дар **фасли панҷуми** боб, дар асоси ифодаҳои (30), (31) ва (37), табиати

асимптотикии параметрҳои динамикии часпакию чандирии аргони моеъ дар рӯйдодҳои ниҳоят пастбасомад ва ниҳоят баландбасомад таҳлил карда шудааст. Нишон дода шудааст, ки дар рӯйдодҳои динамикии пастбасомад ($\nu \rightarrow 0$) қиматҳои модулҳои чандирии динамикӣ ба сифр майл карда, хосиятҳои интиқолии моеъҳо бо қиматҳои пастбасомади коэффитсиентҳои интиқол шарҳ дода мешавад. Механизми интиқол диффузионӣ буда, муодилаҳои интиқол муодилаҳои дифференсиалии тартиби дуҷуми навъи параболӣ мешаванд. Дар рӯйдодҳои динамикии баландбасомад ($\nu \rightarrow \infty$) қиматҳои коэффитсиентҳои динамикии интиқол ба сифр майл карда падидаи динамикии интиқол дар моеъҳо бо қиматҳои баландбасомади модулҳои чандирӣ тавсиф карда шуда, механизми интиқол мавҷӣ шуда, муодилаи интиқол муодилаи дифференсиалии навъи гиперболӣ мешавад.



Расми 5. Вобастагии часпакии ҳаҷмӣ (хатҳои яклухт) ва модули ҳаҷмии чандирӣ (хатҳои рахдор) дар аргони моеъ барои зичиҳои: I - 1402 кг/м³; II - 1240 кг/м³; III - 1031 кг/м³.

Дар боби панҷум моеъҳое баррасӣ мешаванд, ки дар онҳо мубодилаи энергия байни дараҷаҳои озодӣ гуногун исбат ба мубодилаи энергия байни дараҷаҳои озодӣ якхела тезтар мегузарад. Аз нигоҳи математикӣ ин бо шартӣ зерин ифода мешавад

$$\frac{\tau_t}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \gg 1. \quad (38)$$

Дар **фасли якум** ин боб, тавассути муодилаҳои бо шартӣ (38) содакардашудаи гидродинамикаи умумикардасуда барои селҳои J_t^α ва J_r^α , қонуниятҳои интиқоли динамикии масса дар моеъҳои ғайриқутбӣ таҳқиқ карда шудаанд. Муқаррар карда шудааст, ки хосиятҳои динамикии интиқоли масса дар моеъҳои бисёратома асосан тавассути релаксатсияҳои омехта (τ_{tr}) шарҳ дода шаванд ҳам, дар онҳо релаксатсияҳои транслясионӣ (τ_t) ва чархиш (τ_r) низ саҳм мегузоранд.

Барои коэффитсиентҳои динамикии ҳаракатпазирӣ, диффузия, термодиффузия, конвексияи моеъҳои бисёратома ва барои модулҳои чандирии динамикии ба онҳо мувофиқ ифодаҳои аналитикӣ ҳосил карда шудаанд. Аз ҷумла, барои коэффитсиенти динамикии диффузия ва модули динамикии чандирии диффузионӣ ифодаҳои зерин ҳосил карда шудаанд

$$D_{tr}(v) = \frac{D_{tr}}{1+(v\tau_{tr})^2}; \quad M_{tt}(v) = \frac{(v\tau_{tr})^2}{1+(v\tau_{tr})^2} \frac{D_{tr}}{\tau_{tr}}. \quad D_{tr} = \frac{1}{\beta_{tr}} \left(\frac{\partial P(\vec{x}, \vec{\theta}, t)}{\partial n} \right)_T \quad (39)$$

Дар **фасли дуюм**, параметрҳои ба (39) дохилшаванда ба шакли барои ҳисобкуниҳои ададӣ мувофиқ ва беандоза, оварда шудаанд. Масалан,

$$\beta_{tr} = B_{tr} \frac{4\varepsilon\tau}{\sigma} \frac{\tilde{n}}{\tilde{T}} \int_0^\infty \left(\frac{\partial \tilde{\Phi}(r, \theta)}{\partial r} \right) \left(\hat{a} \frac{\partial \tilde{\Phi}(r, \theta)}{\partial \theta} \right) g_0(r, \theta) r^2 dr d\vec{\theta}, \quad B_{tr} = \frac{4\varepsilon\tau}{\sigma}, \quad \tau_{tr} = \frac{\sqrt{Im}}{\beta_{tr}}, \quad (40)$$

ва $\left(\frac{\partial P(\vec{x}, \vec{\theta}, t)}{\partial n} \right)_T$ тибқи ифодаи (34а) бо потенциали аз кунҷҳо вобастаи таъсири мутақобилаи байнимолекулавӣ алоқаманд карда мешавад.

Ба сифати потенциали таъсири мутақобилаи байнимолекулавӣ барои моеъҳои ғайриқутбии бисёратома, потенциали Адхамов-Часовских

$$\tilde{\Phi}(r, \theta) = \begin{cases} \infty, & \text{если } r \leq 1; \\ 4\varepsilon(\theta_{kl}) \left[\left(\frac{\sigma(\theta_{kl}, \theta_{kr}, \theta_{lr}, \dots)}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma(\theta_{kl}, \theta_{kr}, \theta_{lr}, \dots)}{r} \right)^6 \right], & \text{если } 1 < r < \infty. \end{cases} \quad (41)$$

ва барои моеъҳои қутбӣ потенциали Штокмайер.

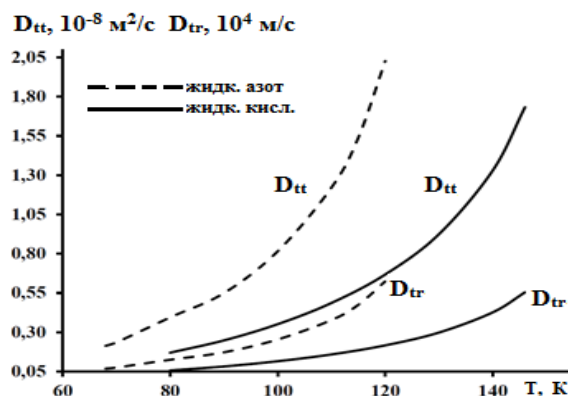
$$\tilde{\Phi}(r, \theta) = \frac{\Phi_{ij}}{4\varepsilon} = [(r)^{-12} - (r)^{-6}] - \chi f(\theta_i, \theta_j, \Delta\varphi) r^{-3}, \quad (42)$$

истифода шудаанд.

Дар ҷадвали 3 натиҷаҳои ҳисобкуниҳои ададии вобастагии вақтҳои хоси релаксатсия (τ_t, τ_{tr}) аз температура дар нитрогени моеъ барои ҚТМ оварда шудаанд. Аз ҷадвал дида мешавад, ки қиматҳои ба натиҷаҳои таҷрибавӣ наздиктар қиматҳои τ_{tr} мебошад. Дар диссертатсия натиҷаҳои ҳисобкунии ададии вобастагии коэффитсиенти соиши дохилӣ (β_t, β_{tr}), ҳаракатпазирӣ (Δ_t, Δ_{tr}), диффузия ($D_t, D_{tr}, D_t^T, D_{tr}^T$) аз температура ва зичӣ оварда шудаанд. Нишон дода шудааст, ки қонуниятҳои вобастагии параметрҳои интиқоли масса дар моеъҳои бисёратома, ба қонуниятҳои ин параметрҳо дар моеъҳои содаи якатома монанданд.

Ба сифати мисол, дар расми 6 натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии коэффитсиентҳои диффузияи нитроген ва оксигени моеъ аз температура барои ҚТМ, оварда шудаанд. Мувофиқи ин расм табиати вобастагии диффузия аз температура барои дараҷаҳои азоди гуногун ва моеъҳои ҳархела монанданд.

Чадвали 3. Натиҷаҳои ҳисоби ададии вобастагии вақтҳои ҳоси релаксатсияи нитрогени моеъ дар қиматҳои мувофиқашудаи температура ва зичӣ аз рӯи формулаҳои (45)				
$T(K)$	$\rho_{\text{кг/м}^3}$	$\tau_t \cdot 10^{12} \text{ с}$	$\tau_{tr} \cdot 10^{12} \text{ с}$	Эксп [221]
68	848	1,05717	2,1196	
70	839	1,13296	2,2672	
80	774	1,66092	3,2965	3,02
90	744	2,05585	4,0492	2,64
100	688	2,74874	5,3770	2,93
110	623	3,74124	7,2744	3,88
115	581	4,51008	8,7451	7,53
120	527	5,9636	11,0167	12,4



Расми 6. Вобастагии коэффисентҳои диффузияи нитрогени моеъ (хатҳои раҳ-рах) ва оксигени моеъ (хатҳои яклухт) аз температура.

Бо ҳамин тарз ва бо назардошти шарт $\tau_r \ll \tau_t$ бо истифода аз потенциали Штокмайер (43), ҳисобкуниҳои вобастагии параметрҳои динамикии интиқоли масса дар моеъҳои кутбии бисёратома (аммиаки моеъ ва об) аз температура ва зичӣ гузаронида шудаанд. Дар

Чадвали 4. Вобастагии коэффисентҳои диффузияи об аз температура дар ҚТМ.					
Тем. п. T, K	$D_t, 10^{-9} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$	$D_r, 10^{12} \frac{1}{\text{с}}$	$D_{tr}, 10^2 \frac{\text{м}}{\text{с}}$	T, K	$D, 10^{-9} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$
273	1,0901	1,3635	0,1561	Эксперимент	
278	1,1246	1,3940	0,1594	278	1,43
288	1,2358	1,4590	0,1656	283	1,68
303	1,3054	1,5702	0,1732	288	1,97
323	1,4546	1,7277	0,1823	298	2,57
343	1,6409	1,9086	0,1889	308	3,48
353	1,7368	2,0080	0,1914	318	4,38
363	1,8403	2,1128	0,1934	328	5,45
373	1,9305	2,2254	0,1949		

ҷадвали 4 натиҷаҳои ҳисоби ададии вобастагии коэффисентҳои диффузияи об аз температура дар ҚТМ оварда шудаанд. Дар ин ҷо ба он нукта диққат додан лозим аст, ки тибқи шарт (38) дар моеъҳои бисёратома саҳми таъсири омехта (D_{tr}) муайянкунанда аст, аммо дар ҷадвали 4 натиҷаҳои таҷрибавӣ аз рӯи қимат ва

андоза ба коэффисенти диффузияи транслясионӣ (D_t) наздиканд. Шояд, новобаста аз шартҳои истифодашуда, саҳми дараҷаҳои озодии транслясионӣ дар интиқоли физикии масса, ҳеҷ набошад барои моеъҳои бисёратомаи шакли молекулаҳояшон начандон мураккаб калон боқӣ монад.

Дар **фаслҳои сеюм ва чоруми** ин боб ҳосиятҳои динамикии часпакию чандирии моеъҳои бисёратома баррасӣ шудаанд. Аз ҷумла, дар асоси ҳалли системаи муодилаҳои (19), (20) бо назардошти шарт (38), барои коэффисенти динамикии часпакии лағжиш ва модули чандирии ба он мувофиқи моеъҳои бисёратома ифодаҳои зарин ҳосил карда шудаанд

$$\eta_{str}(v) = \frac{\mu_{str} a \tau_{tr}}{2(1+(v\tau_{\text{эф}})^2)(1+(v\tau_{tr})^2)}; \mu_{str}(v) = \frac{\mu_{str} a v^2 \tau_{tr} \tau_{\text{эф}}}{2(1+(v\tau_{\text{эф}})^2)(1+(v\tau_{tr})^2)}, \quad (43)$$

ки инҷо $\tau_{\text{эф}} = \frac{10\tau_{tr}^2(\tau_{tt}+\tau_{rr})}{3\tau_{tt}\tau_{rr}}$, $\mu_{tr} = \mu_t + \mu_r$, $a = \sqrt{\frac{l}{m}}$. Аз ифодаи (43) дида мешавад, ки дар муайянкунии ҳосиятҳои динамикии часпакию чандирии моеъҳои бисёратома

падидаҳои релаксатсионии омехта (τ_{tr}) сахми асосӣ доранд, лекин сахми релаксатсияҳои транслясионӣ (τ_{tt}) ва чархиш (τ_{rr}) низ тавассути $\tau_{эф}$ дар шакли $\frac{\tau_{tt}\tau_{rr}}{\tau_{tt} + \tau_{rr}}$ ба назар гирифта мешаванд.

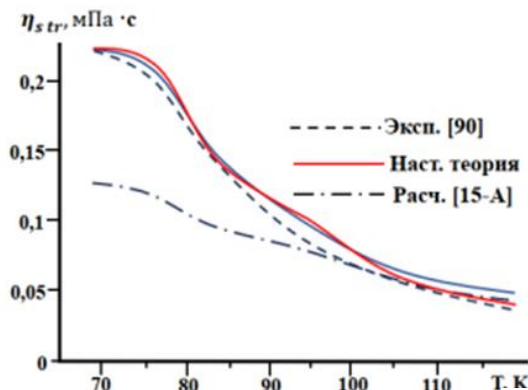
Натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии қиматҳои пастбасомади часпакии лағжиш ($\eta_{str}(0) = \mu_{str} \alpha \tau_{tr}$) аз температура ва зичӣ барои об дар ҷадвали 5 инъикос ёфтаанд. Мувофиқати хуби натиҷаҳои ҳисобкунӣ бо маълумоти таҷрибавӣ дар соҳаҳои температураҳои паст ва зичиҳои калон ба назар мерасад.

Ҷадвали 5. Вобастагии часпакии лағжиши нитрогени моеъ (η_{str} , мПа.с)

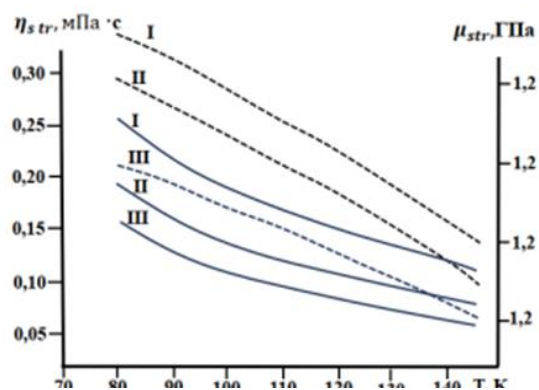
аз температура ва зичӣ.

Темп Т, К	Плотность кг/м ³									Ҳисоб [15-А]
	848	839	774	744	688	623	581	527	Таҷр	
68,08	0,2218	0,2126	0,1557	0,1344	0,1014	0,0719	0,0569	0,0412	0,2210	0,1251
70,23	0,2173	0,2082	0,1527	0,1319	0,0997	0,0709	0,0562	0,0408	0,2000	0,1245
80,00	0,2007	0,1925	0,1420	0,1231	0,0938	0,0675	0,0540	0,0398	0,1400	0,1240
90,00	0,1887	0,1811	0,1345	0,1170	0,0898	0,0654	0,0528	0,0396	0,1010	0,0870
100,00	0,1799	0,1728	0,1291	0,1128	0,0872	0,0642	0,0523	0,0398	0,0750	0,0620
110,00	0,1732	0,1665	0,1253	0,1098	0,0855	0,0636	0,0523	0,0403	0,0560	0,0450
115,00	0,1705	0,1640	0,1237	0,1086	0,0849	0,0635	0,0524	0,0406	0,0450	0,0370
120,00	0,1681	0,1617	0,1224	0,1076	0,0845	0,0635	0,0526	0,0410	0,0370	0,0290

Ин хосиятҳо дар расми 7, ки дар он натиҷаҳои ҳисобкунии ададии қиматҳои $\eta_{str}(T)$ дар ҚТМ оварда шудаанд, ба таври возеҳтар намоёнанд.



Расми 7. Натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии коэффисиенти часпакии ғеҷиши нитрогени моеъ аз температура.



Расми 8. Вобастагии часпакии лағжиши (хатҳои яклухт) ва модули чандирии лағжишии оксигени моеъ (хатҳои рахдор) барои се қимати зичӣ

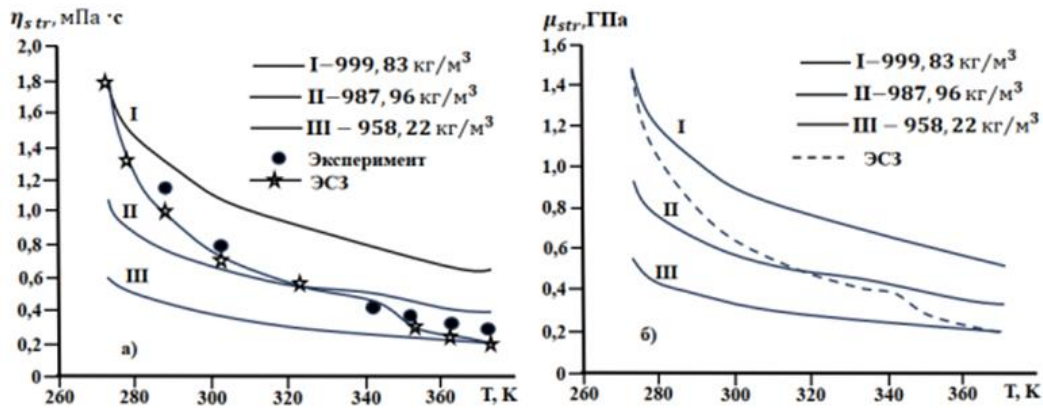
Натиҷаҳои ҳисобкунии ададии вобастагии коэффисиенти часпакии ҳаҷмӣ ва модули чандирии ҳаҷмӣ ба он мувофиқ аз температура ва зичӣ барои нитрогени моеъ, ки дар ҷадвали 6 оварда шудаанд, ки айнан ба натиҷаҳои боло монанданд. Тавре ки дида мешавад, қиматҳои изобарии (диагоналии) $\eta_{vtr}(T)$ дар тамоми фосилаи тағйирёбии температура бо афзоиши температура мунтазам кам мешаванд, аммо қиматҳои изохории $\eta_{vtr}(T)$ (аз рӯйи сутунҳо), махсусан дар зичиҳои паст (527 кг/м³), аввал бо афзоиши температура кам шуда, сипас аз температураи 90К сар карда афзоиш меёбанд, ки бо таҷриба мувофиқ аст.

Ҷадвали 6. Вобастагии часпакии ҳаҷмии нитрогени моеъ (η_{Vtr} , мПа · с)
аз температура ва зичӣ

Темпер. T, K	Плотность, кг/м ³								Таҷр
	848	839	774	744	688	623	581	527	
68,08	0,1592	0,1525	0,1117	0,0964	0,0728	0,0516	0,0408	0,0295	-
70,23	0,1559	0,1494	0,1096	0,0947	0,0716	0,0509	0,0403	0,0293	-
80,00	0,1441	0,1382	0,1019	0,0884	0,0673	0,0484	0,0387	0,0286	0,0970
90,00	0,1354	0,1300	0,0965	0,0840	0,0645	0,0469	0,0379	0,0284	0,0860
100,00	0,1291	0,1240	0,0927	0,0809	0,0626	0,0461	0,0375	0,0286	0,0900
110,00	0,1243	0,1195	0,0899	0,0788	0,0614	0,0457	0,0375	0,0289	0,0990
115,00	0,1223	0,1177	0,0888	0,0779	0,0610	0,0456	0,0376	0,0292	0,1400
120,00	0,1206	0,1161	0,0879	0,0772	0,0606	0,0456	0,0377	0,0294	0,2030

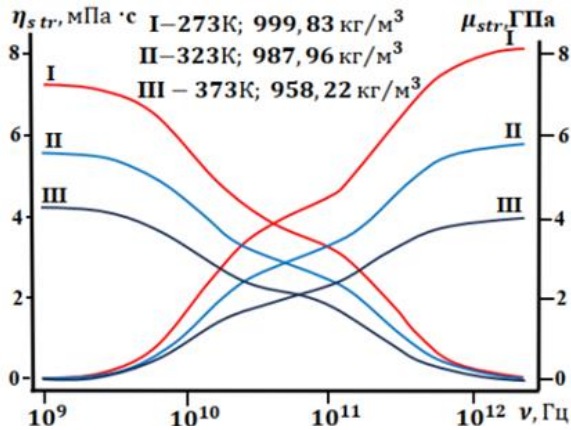
Аз муқоисаи маълумот оид ба ҳосиятҳои часпакию чандирии моеъҳои бисёратома мушоҳида кардан мумкин аст, ки натиҷаҳои назарияи кинетикии моеъҳои содаи бисёратома бо истифода аз потенциали Леннард-Чонс [15-А] ҳосиятҳои ин моеъҳоро дар соҳаҳои температураҳои баланд ва зичии паст (наздиқ ба соҳаи газӣ) беҳтар тавсиф менамоянд. Натиҷаҳои содакардашудаи дар ин боб истифодашуда (43), бо истифода аз потенциали Адҳамов – Часовских (41) бошад, ҳосиятҳои часпакию чандирии моеъҳои бисёратомаро дар соҳаҳои температураҳои паст ва зичии баланд (наздиқ ба ҳолати моеъ) беҳтар шарҳ медиҳанд.

Натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии коэффисиенти часпакӣ ва модули чандирии лағжиши оксигени моеъ аз температура барои се қимати зичӣ дар расми 8 оварда шудаанд. Яхела будани табиати аз температура вобаста будани параметрҳои интиқол - η_{Stt} (T) ва μ_{Stt} (T) дар моеъҳо бори дигар тасдиқ мекунад, ки табиати ин вобастагӣ ба сохтори моеъ алоқаманд аст, на ба релаксатсия. Дар расми 8 таъсири релаксатсияро ҳам равшан мушоҳида намудан мумкин аст. Таъсири релаксатсия табиати вобастагиро нею сифати онро дигар мекунад, хатҳои барҷастаи μ_{Stt} (T) – ро, ба хатҳои фурӯҳамидаи η_{Stt} (T) табдил медиҳад (тибқи ифодаи $\eta_{Stt} = \mu_{Stt} \tau_{tr}$), лекин қонуниятҳои бо зиёдшавии температура зиёдшавии ин бузургӣҳо боқӣ мемонад. Натиҷаҳои таҳқиқи ҳосиятҳои динамикии часпакию чандирии моеъҳои кутбии бисёратома бо истифода аз потенциали Штокмайер (42) низ, сифатан ба натиҷаҳои моеъҳои ғайрикутбӣ монанданд. Масалан, табиати вобастагии қиматҳои коэффисиенти часпакии лағжиш ва модули чандирии ба он мувофиқи об, ки дар расми 9 барои се қимати зичӣ ва ҚТМ оварда шудаанд, ба табиати ин бузургӣҳо дар моеъҳои ғайрикутбӣ монанд мебошанд. Мувофиқи ифодаҳои (43), дисперсияи басомадии параметрҳои динамикии часпакию чандирии моеъҳои бисёратома, камаш ду соҳаи релаксатсияи бо вақтҳои ҳоси $\tau_{эф}$ ва τ_{tr} тавсифшаванда доранд.



Расми 9. Натиҷаҳои ҳисокунии вобастагии коэффисиенти чапакии ғеҷиш $\eta_{Str}(T)$ - (рас.9а) ва модули чандирии ғеҷиш $\mu_{Str}(T)$ -- (рис. 9б) аз температура дар об барои се қимати зичӣ ва ҚТМ

Дар расми 10, ки дар он натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии коэффитсиенти динамикии часпакии лағжиш ва модули динамикии чандирии ба он мувофиқ аз басомад оварда шудаанд ду соҳаи релаксатсия равшан ба назар мерасад.



Расми 10. Вобастагии коэффитсиенти динамикии часпакии лағжиш ($\eta_{str}(\nu)$) ва модули динамикии чандирии лағжиш ($\mu_{str}(\nu)$) аз басомад дар об барои се ҚТМ температура ва зичӣ.

Дар **боби шашум** натиҷаҳои таҳқиқи термодинамикӣ ва молекулавӣ-статистикӣ хосиятҳои мувозинатӣ ва динамикии параметрҳои гармофизикӣ моеъкристаллҳои нематикӣ (МКН), бо назардошти саҳми тартиби тамоилии дур дар онҳо, оварда шудаанд. Дар **фасли якуми боб**, дар асоси ифодаи Ландау-Де Жен барои потенциали термодинамикии Гиббс нисбати параметри тензори тартиби тамоилӣ, барои қисматҳои тамоилӣ, флуктуатсионӣ ва деформатсионӣ потенциалҳои термодинамикӣ ифодаҳое

ҳосил карда шудаанд, ки барои омӯхтани хосиятҳои аномалии тамоилии параметрҳои гармофизикӣ ва чандирии МКН, дар атрофи нуқтаи мубодилаи фазаии МКН-МИ имкон медиҳанд.

Дар **фасли дуюми боб** барои параметри тартиби тамоилии мувозинатӣ ифодаи аналитикии зерин

$$\eta(P, T) = \frac{3}{4} \eta_c \left(1 \pm \frac{\sqrt{T_i - T + \beta(P_c - P)}}{3\sqrt{T_i - T_c}} \right), \quad \eta = 0, \quad (44)$$

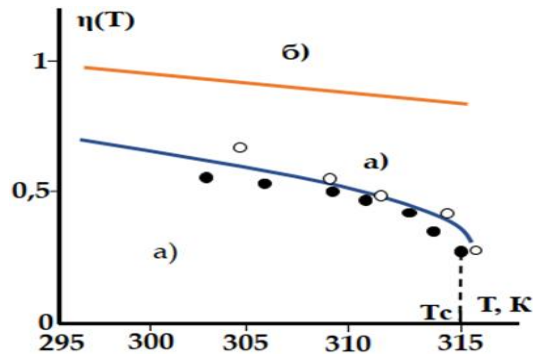
ёфта шудааст, ки дар он T_c , P_c , η_c – қиматҳои критикӣ температура, фишор, параметри тартиби тамоилӣ, T_i – температурае, ки аз он болотар фазаи нематикӣ қомилан ноустувор аст, β - бузургии доимӣ, мебошанд. Натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии η аз температура ва фишор барои МББА тибқи формулаи (44) дар расми 11 оварда шудааст. Аз расми 11 дида мешавад, ки бо зиёд шудани фишор хосиятҳои аномалии $\eta(P, T)$ ба соҳаи температураҳои баландтар мекӯчад.

Барои қисмҳои аномалии гармигунҷоиш ва таъзиқёбии МКН низ, ифодаҳои аналитикӣ ёфта шуда, барои онҳо ҷой доштани таносуби Эренфест нишон дода шудааст

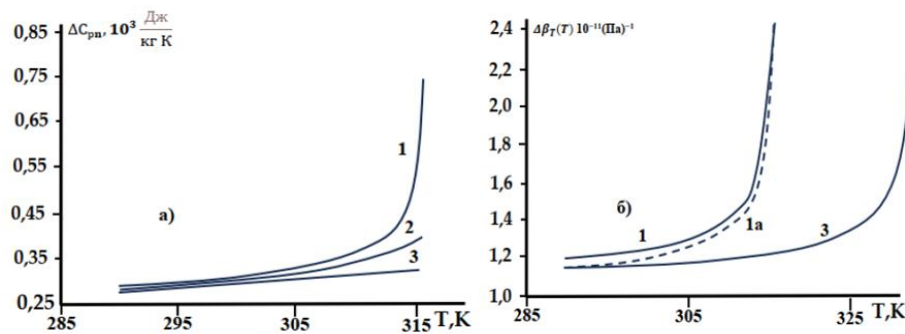
$$\Delta C_{pn}(\eta) = \frac{27}{64} \frac{\alpha \eta_c^2 T}{(T_i - T_n)} \left(1 + \frac{\sqrt{T_i - T_n}}{\sqrt{T_i - T + \beta(P - P_c)}} \right), \beta_T = -\frac{27}{64} \frac{\alpha \beta^2 \eta_c^2}{(T_i - T_n)} \left(1 + \frac{\sqrt{T_i - T_n}}{\sqrt{T_i - T + \beta(P - P_c)}} \right), |\Delta \beta_T| = \beta^2 \frac{\Delta C_p}{T} \quad (45)$$

Дар расми 12 вобастагии қисмҳои аномалии гармигунҷоиш ва таъзиқёбии МББА аз температура ва фишор тибқи ифодии (45) оварда шудаанд.

Аз ин расмҳо низ, ба хубӣ дида мешавад, ки бо баланд шудани фишор соҳаи аномалӣ $\Delta C_{pn}(T)$ и $\Delta \beta_T(T)$ ба тарафи температураҳои баландтар мекӯҷад. Хатти рахнадор дар расми 12б аз рӯи қиматҳои $\Delta C_{pn}(T)$, мувофиқи таносуби Эренфест сохта шудааст, ки мувофиқаи ифодаҳои моро бо таносубҳои маълуми термодинамикӣ, асоснок мекунад.



Расми 11. Вобастагии параметри тартиби тамоилӣ аз ҳарорат барои МББА. дар ду қимати фишор а) $P = P_c$; б) $P - P_c = 10^7$ Па



Расми 12. Вобастагии қисми аномалии гармигунҷоиш ΔC_{pn} , ва таъзиқпазирӣ $\Delta \beta_T$ аз температура, ҳангоми 1) $P = P_c$; 2) $P - P_c = 10^7$ Па 3) $P - P_c = 5 \cdot 10^7$ Па. барои МББА.

Дар **фасли сеюми** боб саҳми флукуатсияи параметри тартиби тамоилӣ, ки дар атрофи нуқтаи мубодилаи фазаӣ чӣ дар фазаи нематикӣ ва чӣ дар фазаи изотропӣ хеле меафзоёнд, дар муайян кардани қиматҳои қисми аномалии гармигунҷоиши МКН нишон дода шудаанд. Барои саҳми флукуатсияи тартиби тамоили дар гармигунҷоиши МКН ΔC_{pn}^f и ΔC_{pi}^f ифодаҳои аналитикӣ ёфта шудаанд. Барои қисмати аномалии гармигунҷоиши бо назардошти саҳми тартиби тамоили ва флукуатсияи тартиби тамоилӣ ифодаҳои зерин ҳосил карда шудаанд

$$\begin{aligned} \Delta C_{pn}(P, T) &= C_{pn}(P, T) - C_{pi}^R(P, T) = \Delta C_{pn}(P, T, \eta) + \Delta C_{pn}^f(P, T) \\ \Delta C_{pi}(P, T) &= C_{pi}(P, T) - C_{pi}^R(P, T) = \Delta C_{pi}^f(P, T). \end{aligned} \quad (46)$$

Дар расми 13 натиҷаҳои ҳисобкунии ададии вобастагии қисмати аномалии тамоилии гармигунҷоиши МББА аз температура тибқи ифодаҳои (46) оварда шудаанд. Хатти ростии 3 ва нуқтаҳо аз таҷриба гирифта шудаанд. Мувофиқати натиҷаҳои назарияӣ ва таҷрибавӣ хуб аст. Аз (46) бармеояд, ки барои дониستاني қонуниятҳои вобастагии гармигунҷоиши умумии МКН аз температура ва фишор дар ҳар ду фаза, дониستاني вобастагии қисмати мутаасили гармигунҷоиш $C_{pi}^R(P, T)$ аз аз ин бузургӣҳо зарур аст. Ин масъала дар фасли 5-уми боб бо истифода аз

назарияи молекулавӣ-статистикӣи моеъҳои асимметрии дар бобҳои 2-3 таҳия карда шуда, баррасӣ карда мешавад.

Бо истифода аз потенциали Майер - Заупе $\tilde{\Phi}(\theta) = -\eta \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta_i - \frac{1}{2} \right)$ барои энергияи дохилии МКН ифода зерин ёфта шудааст.

$$e(T, \rho) = \frac{12\epsilon}{\pi\sigma^2 L} \tilde{n} \tilde{T} + \frac{128\epsilon}{\sigma L^2} y(1) \tilde{n}^2 + \frac{32\epsilon}{\pi\sigma L^2} \tilde{n}^2 C(r) a(\theta) - \frac{32\epsilon}{\pi\sigma L^2} \tilde{n}^2 a(r) a(\theta) \eta^2, \quad (47)$$

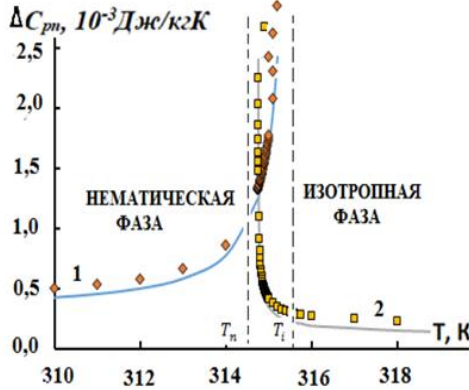
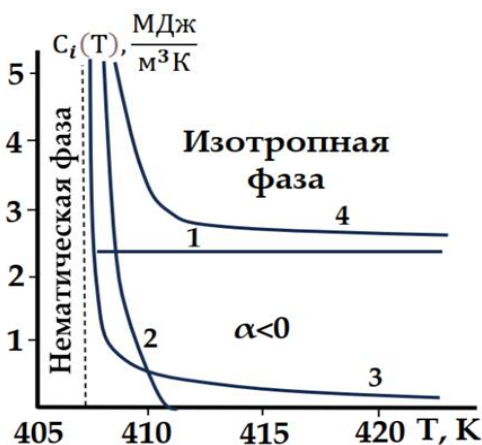


Рис. 13. Температурная зависимость теплоёмкости МББА в окрестностях точки фазового перехода НЖК-ИЖ

$$c_{pi}^R(T, n) = c_{pi}^k(T, n) + c_{pi}^c(T, n) + c_{pi}^r(T, n) + c_{pi}^\theta(T, n) + c_{pi}^{r\theta}(T, n), \quad (48)$$

ки дар он саҳми: ҳаракати ҳароратии молекулаҳо - c_{pi}^k ; бархӯрдҳои чандирӣ - c_{pi}^c ; сохтори радиалӣ ва таъсири мутақобилаи радиалӣ - c_{pi}^r ; сохтори ориентатсионӣ ва таъсири мутақобилаи ориентатсионӣ - c_{pi}^θ ; таъсири мутақобилаи омехтаи сохторҳо ва дараҷаҳои озод - $c_{pi}^{r\theta}$ - ро ифода мекунад. Дар диссертатсия ифодаҳои молекулавӣи ҳамаи ин чузъҳои гармигунҷоиш оварда шудаанд.

Дар расми 14 натиҷаи ҳисобкунии вобастагии гармигунҷоиши фазаи изотропии ва чузъҳои он барои ПАА тибқи ифодаҳои (46), (48) оварда шудаанд.



Расми 14. Натиҷаҳои ҳисобкунии и ададии вобастагии ҳароратии чузъҳои гармигунҷоиши ПАА дар фазаи изотропӣ.

Мувофиқи ин ифода, энергияи дохилӣ, ҳамчун потенциали термодинамикӣ дар атрофи изотропии нуқтаи табдили фазавӣ аз параметри тартиби тамоилӣ ҳамчун η^2 вобаста аст, ки ба имконияти ҷой доштани тартиби тамоилии наздик (short order) дар фазаи изотропии МКН ишора мекунад.

Аз қонуни якуми термодинамика ва ифодаҳои (47), (33) истифода намуда, барои қисми мутаасили гармигунҷоиши МКН ифодаи зерин ҳосил карда шудааст

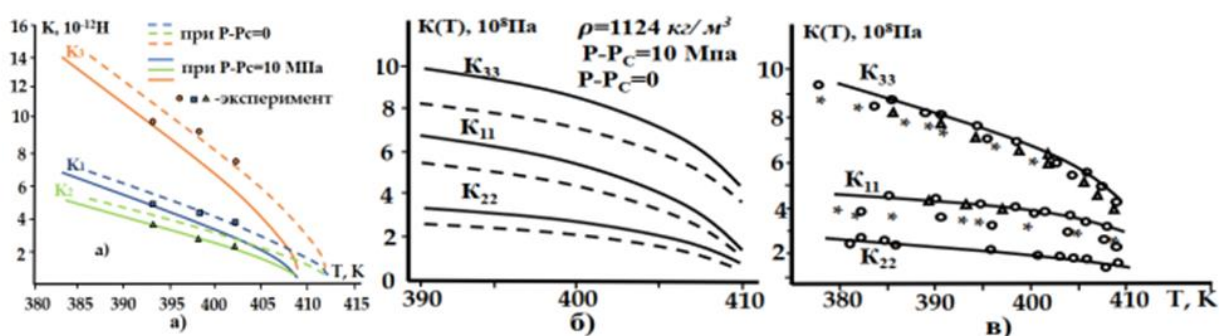
Хатти ростӣ 1 вобастагии қисмати радиалии гармигунҷоиши фазаи изотропӣ $C_{pi}(T, r) = c_{pi}^k + c_{pi}^c + c_{pi}^r(T)$ -ро аз температура нишон медиҳад (нигаред ба хатти ростӣ 3 дар расми 13). Хатти қачи 2 вобастагии қисми тамоилии гармигунҷоиши фазаи изотропӣ $C_{pi}(\theta) = c_{pi}^\theta(T) + c_{pi}^{r\theta}(T)$ -ро аз температура ифода менамояд. Он табиати ғайрихаттӣ дорад, вале дар як фосилаи хеле ками ($\Delta T \approx 3K$) атрофи изотропии нуқтаи табдили фазавӣ ҷой дорад. Хатти қачи 3 саҳми флуктуатсияи тартиби тамоилиро инъикос мекунад, ки мо онро дар фасли гузашта баррасӣ кардем. Хатти қачи 4 вобастагии

суммаи ҳамаи чузъҳо – қимати гармигунҷоиши фазаи изотропиро аз температура муайян мекунад. Чунин таҳлили чузъ ба чузъи гармигунҷоиш бори аввал гузаронида шудааст ва натиҷаҳои ба маълумоти дар адабиёт мавҷуда мувофиқ аст.

Дар фаслҳои чорум ва шашуми боб бо истифода аз усулҳои термодинамикӣ ва молекулавӣ-статистикӣ хосиятҳои чандирӣ-тамоилии МКН таҳқиқ карда шудаанд. Дар фасли чорум дар асоси ифодаи қисмати деформатсионии потенциали термодинамикӣ, барои коэффисиентҳои деформатсияҳои чандирии тамоилии МКН ифодаҳои содаи зерин ҳосил карда шудаанд.

$$K_1 = 10.08 \cdot 10^{-7} \eta^2, \text{Н}; \quad K_2 = 7.66 \cdot 10^{-7} \eta^2, \text{Н}; \quad K_3 = 22.77 \cdot 10^{-7} \eta^2, \text{Н}. \quad (49)$$

Натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии коэффисиентҳои чандирии тамоилии ПАА аз температура ва фишор дар асоси формулаҳои (49) дар расми 15а оварда шудаанд.



Расми 15. Натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии коэффисиентҳои (K_1, K_2, K_3) ва модулҳои (K_{11}, K_{22}, K_{33}) чандирии тамоилии ПАА аз температура: а) бо усули термодинамикӣ; б) бо усули молекулярӣ-статистикӣ; в) таҷрибавӣ оварда шудаанд.

Мувофиқати натиҷаҳои таҷрибавӣ ва ҳисобкуниҳо қаноатбахшанд.

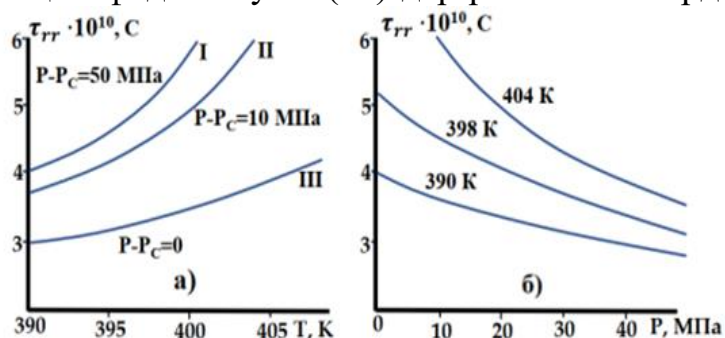
Дар **фасли шашуми боб** нишон дода шудааст, ки модулҳои чандирии ба ифодаи

$A_r^{\alpha\beta}$ (20) дохилшаванда-ифодаҳои (21) метавонанд, бари тавсифи хосиятҳои чандирии тамоилии МКН ҳангоми деформатсияҳои қатшавии арзӣ K_{11} (splay), тобхурӣ K_{22} (torsion) ва қатшавии тулӣ K_{33} (bend) истифода шаванд. Дар расми 15б вобастагии модулҳои чандирии тамоилии ПАА аз температура, зичӣ ва фишор, тибқи ифодаи (21) оварда шудаанд. Дар расми 15в натиҷаҳои таҷрибавӣ ёфтаанд. Дар расми 15 мувофиқати хуби натиҷаҳои назариявӣ бо яқдигар ва бо таҷриба дида мешавад.

Дар **фасли ҳафтум** ифодаи бо назардошти шарт $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$. содакардашудаи сели зарраҳо J_r^α , ки дар он рӯйдодҳои релаксатсионии чархиш нақши асосӣ мебозанд, барои тавсифи параметрҳои тамоилии интиқоли масса дар МКН истифода шудаанд. Барои вақти релаксатсияи чархиш бо истифода аз потенциали Майер-Заупе бе назардошти сохтори радиалӣ ва бо назардошти $g_0(r, \theta)$ ифодаҳои аналитикии зерин ёфта шудаанд

$$\tau_{rr} = \frac{10 I \bar{T} \int_0^\pi e^{-\frac{\eta}{4}(\frac{3}{2} \cos^2 \theta_i - \frac{1}{2})} \sin \theta_i d\theta_i}{81 \tau \frac{A}{V_m^2} \eta^2 \int_0^\pi e^{-\frac{\eta}{4}(\frac{3}{2} \cos^2 \theta_i - \frac{1}{2})} \cos^2 \theta_i \sin^3 \theta_i d\theta_i}, \quad \tau_{rr} = \frac{I \bar{T}}{324 \varepsilon \tau \bar{n} \int_0^\pi \int_0^\infty \sin^3 \theta \cos^2 g_0(r, \theta) r^2 dr d\theta}. \quad (50)$$

Натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии τ_{rr} аз температура ва фишор барои ПАА тибқи ифодаи якуми (59) дар расми 16 оварда шудааст. Афзуншавии $\tau_{rr}(T)$ бо зиёдшавии температура дар



Расми 16. Вобастагии вақти релаксатсияи чархиш τ_{rr} аз температура дар се қимати фишор (а) ва аз фишор дар се қимати температура (б) барои ПАА.

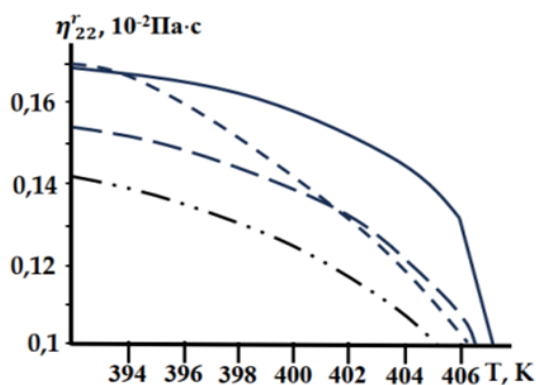
расми 16 аз табиати термикии ин падидаи релаксатсионӣ шаҳодат медиҳад. Бо афзоиши фишор камшавии $\tau_{rr}(P)$ ба хосиятҳои τ_{rr} барои моеъҳо мувофиқ аст.

Бо истифода аз қиматҳои τ_{rr} вобастагии коэффисиентҳои соиши дохилии чархиш $\beta_r = \frac{l}{\tau_r}$ ($\tau_r = \frac{3}{5} \tau_{rr}$), ҳаракпазирӣ $\Delta_r = \frac{1}{\beta_r}$, диффузия $D_r = \frac{k_B T}{\beta_r}$, ва дигар

параметрҳо аз температура, зичӣ ва фишор ҳисоб карда шудаанд.

Дар **фасли охирин, ҳаштум**, дар асоси ифодаи дуҷуми (29) хосиятҳои динамикии часпакӣ-чандирии тамоилии МКН таҳқиқ карда шуда, барои қиматҳои пастбасомади коэффисиентҳои часпакиҳои тамоилии МКН ифодаҳои $\eta_{22} = \tau_{rr} K_{11}$, $\eta_{22} = \tau_{rr} K_{22}$, $\eta_{33} = \tau_{rr} K_{33}$, $\eta_V^r = \tau_{rr} K_V^r$ ҳосил карда шудаанд.

Бо истифода аз қиматҳои ҳисобшудаи K_{11} , K_{22} , K_{33} дар фасли шашум ва қиматҳои τ_{rr} аз фасли ҳафтум,



Расми 17. Вобастагии коэффисиенти часпакии тамоилии ПАА аз температура барои се қимати зичӣ: — 1158 кг/м³; - - 1138 кг/м³; - · - 1124 кг/м³ и ---- ЭСЗ.

вобастагии коэффитсиентҳои часпакии тамоилии ПАА аз температура, фишор ва зичӣ таҳқиқ шудаанд. Натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии коэффитсиенти часпакии тамоилии η_{22} аз температура дар се қимати зичӣ ва ҚТМ дар расми 17 оварда шудаанд. Якхела будани табиати вобастагии $\eta_{22}^r(T)$ и $K_{22}(T)$ ба нақши муайянкунандаи сохтори МКН дар муайян кардани табиати вобастагии параметрҳои интиқол аз температура ишора мекунад.

Дар расми 18а,б натиҷаҳои ҳисобкунии вобастагии коэффитсиенти часпакии тамоилии ПАА аз зичӣ (а) ва аз фишор (б) дар қиматҳои гуногуни температура оварда шудаанд.

Тавре ки дида мешавад, табиати вобастагии параметрҳои тамоилии интиқол дар МКН аз тағйирёбии параметрҳои термодинамикии ҳолат ҳамон гуна аст, ки дар моеъҳои якатома ва бисёратома буд. Қонуниятҳои шабеҳ барои коэффитсиенти часпакии ҳаҷмии чархиш ва барои модули чандирии ба он мувофиқ низ, ҷой доранд.

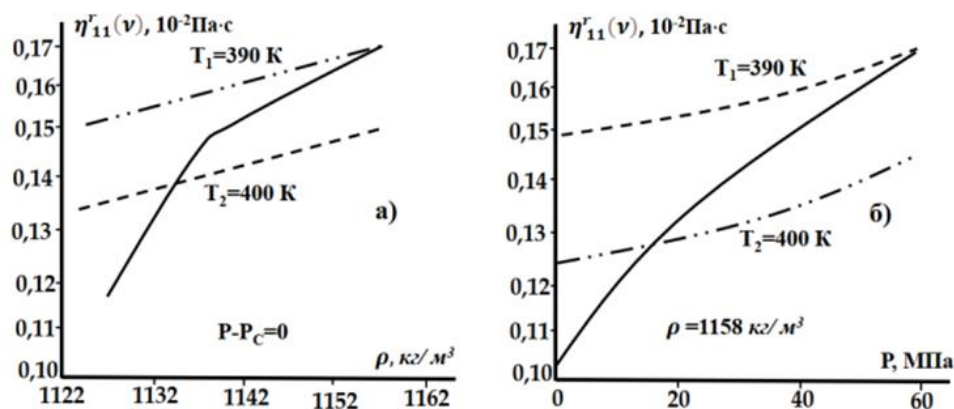


Рис. 18. Натиҷаҳои ҳисоби ададии вобастагии қиматҳои пастбасомади коэффитсиенти динамикии часпакии тамоилии ПАА аз зичӣ (а) ва аз фишор (б).

Дар асоси натиҷаҳои дар бобҳои 4-6-и диссертатсия овардашуда метавон гуфт, ки муодилаҳои бо назардошти хусусиятҳои хоси сохтори молекулавии моеъҳо содакардашудаи гидродинамикаи умумикардашуда падидаҳои интиқоли релаксатсияро дар моеъҳои якатомаю бисёратома ва моеъкристалҳои нематикӣ сифатӣ, дар баъзе ҳолатҳо миқдоран ҳам шарҳ дода метавонанд.

Истифодаи муодилаҳои умумитар, масалан бо дарназардошти таъсири мутақобилаи интиқоли масса, импульс, моменти импульс ва гармӣ бо якдигар, ё бо назардошти коррелятсияи компонентҳои гуногуни селҳо ва ғайра, бояд натиҷаҳои дақиқтару бозътимодтар дода тавонанд. Ҳамзамон, ҳалли ададии муодилаҳои мураккаб бо истифода аз имкониятҳои компютерҳои муосир низ, дурнамои умедбахш дорад.

ХУЛОСАҶО ВА ТАВСИЯҶО

ХУЛОСАҶО. 1. Назарияи молекулавӣ-статистикӣ падидаҳои интиқол ва релаксатсия дар моеъҳои мураккаби асимметрӣ таҳия карда шудааст. Амсилаи аз амсилаи моеъҳои молекулаҳояшон курашкли чандир умумитар - моеъҳои молекулаҳояшон якхелаи саҳти шаклашон дилҳоҳ, пешниҳод карда шудааст. [1-A,2-A,7-A,11-A,13-A,34-A,55-A]

2. Бо зиёд намудани шумораи бузургҳои динамикии ҳолати ғайримувозинатии моеъро тавсифкунанда ва дақиқтар истифода намудани координатаҳои кунҷӣ дар муайян кардани мавқеи молекулаҳои ғайрисферӣ дар фазои фазавӣ, усули НФР барои ташҳиси падидаҳои интиқоли динамикӣ ва релаксатсия дар моеъҳои мураккаби асимметрӣ, такмил дода шудааст. [1-A,2-A,10-A,11-A,37-A,46-A,55-A]

3. Системаи мутақобилан алоқаманд ва пӯшидаи муодилаҳои эволютсияи бузургҳои динамикии ҳолати ғайримувозинатии моеъро муайянкунанда таҳия карда шудааст, ки асоси ташҳиси падидаҳои интиқоли динамики ва релаксатсия дар моеъҳои омӯхташаванда буда метавонанд. Муодилаҳои термикӣ ва калорикии ҳолат, инчунин ифодаҳои бузургҳои дигари макроскопии ҳолати ғайримувозинатии моеъро муайянкунанда ҳосил карда шудаанд. [2-A,10-A,11-A,13-A,34-A,45-A,77-A,]

4. Системаҳои муодилаҳои сарбастаи гидродинамикаи умумикардашуда (релаксатсионӣ) таҳия карда шудаанд, ки ба таҳқиқи падидаҳои интиқоли динамикии масса, импульс ва моменти импульс дар моеъҳои мураккаби асимметрӣ

бо дарназардошти сахми хусусиятҳои сохтори молекулавии моеъ ва механизмҳои рӯйдодҳои релаксационии дохилӣ дар онҳо ҷойдошта, имкон медиҳад. [2-A, 10-A, 19-A, 44-A, 55-A, 77-A, 78-A, 79-A]

5. Таҳлили ботафсили механизмҳои молекулавии падидаҳои релаксационии дар моеъҳои омӯхташаванда ҷойдошта гузаронида шуда, муайян карда шудааст, ки ҳамаи вақтҳои релаксатсияи дар муодилаҳои гидродинамикаи умумикардашуда воридшаванда тавассути се вақти асосии релаксатсияҳо: - транслясионӣ (τ_t), чархиш (τ_r) ва байниҳамдигарӣ (интерференсионӣ) (τ_{tr}) ифода мешаванд. [19-A, 23-A, 10-A, 11-A, 13-A, 34-A, 77-A]

6. Рӯйдодҳои то кинетикии молекулавӣ таҳқиқ карда шуда, муқаррар карда шудааст, ки дар фосолаи байни бархӯрдҳо ба молекулаҳои ғайрисферӣ аз тарафи молекулаҳои ҳамсоя қувваҳои тасодуфии $F(t)$ ва моментҳои қувваҳои тасодуфии $N(t)$ таъсир намуда ҳаракатҳои пешраванда ва чархиши онҳоро диссипативӣ менамоянд. Ин диссипатсияҳо дар вақтҳои ҳоси релаксатсия тавассути ифодаҳои корреляторҳои мувозинатии $\langle F(0)F(t) \rangle_0$, $\langle N(0)N(t) \rangle_0$ $\langle F(0)N(t) \rangle_0$ ба назар гирифта шуда, барнагардандагии муодилаҳои интиқолро таъмин менамоянд. [12-A, 19-A, 63-A, 74-A, 76-A, 77-A]

7. Муодилаҳои гидродинамикаи умумикардашудаи бо назардошти шартҳои $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \ll 1$ содакардашуда, ки дар онҳо падидаи релаксатсияи транслясионӣ нақши муайянкунанда мебозад, барои таҳқиқи рӯйдодҳои динамикии интиқоли масса ва импульс дар моеъҳои содаи як атома (аргони моеъ) истифода шудаанд.

Барои вақти релаксатсияи транслясионӣ, коэффитсиентҳои динамикии соиши дохилӣ, ҳаракатпазирӣ, диффузия, термодиффузия, конвексия, часпакии лағжиш ва ҳаҷмӣ, инчунин модулҳои чандирии ба онҳо мувофиқ ифодаҳои аналитикӣ ёфта шуда вобастагии онҳо аз температура, зичӣ ва басомади ошӯби беруна ҳисоб карда шудааст. Нишон дода шудааст, ки натиҷаҳои дар диссертатсия овардашуда умумитар буда, маълумоти мавҷударо нисбати ҳосиятҳои моеъҳои содаи аз молекулаҳои сферӣ иборат низ дар бар мегиранд. [20-A, 21-A, 23-A, 50-A, 1-A, 77-A]

8. Системаҳои муодилаҳои гидродинамикаи умумикардашудаи бо назардошти шартҳои $\frac{\tau_t}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_r}{\tau_{tr}} \gg 1$ содакардашуда барои таҳқиқи падидаҳои интиқол ва релаксатсия дар моеъҳои бисёратома истифода шудаанд. Муайян карда шудааст, ки дар ин маврид рӯйдодҳои динамикии интиқол дар моеъҳои бисёратома асосан тавассути падидаи релаксационии интерференсионӣ (τ_{tr}) тавсиф мешаванд, лекин ҳамаи се падидаҳои релаксационии дигар ҳам сахм мегузоранд. Нишон дода шудааст, ки самти селҳои транслясионӣ ва чархиш дар интиқоли масса дар моеъҳои бисёратома ба ҳамдигар амудӣ буда, сахми яке қимати дигарашро кам мекунад. [11-A, 12-A, 21-A, 43-A, 52-A, 81-A]

9. Ҳосиятҳои динамикии часпакию чандирии моеъҳои бисёратомаи кутбӣ ва ғайрикутбӣ таҳқиқ карда шудаанд. Вобаста ба ғайрисферӣ будани молекулаҳо ҳосилшавии коэффитсиентҳои иловагии часпакӣ ва модулҳои чандирии бо онҳо мувофиқ ошкор карда шудааст. Нишон дода шудааст, ки қонуниятҳои дисперсияи басомадии параметрҳои динамикии часпакию чандирии моеъҳои бисёратома,

камаш ду соҳаи релаксационии бо вақтҳои релаксатсияи τ_{tr} ва $\tau_{эф} = \frac{10}{3}(\tau_{tr})^2 \frac{\tau_t + \tau_r}{\tau_t \tau_r}$ тавсифшаванда доранд. [6-А, 15-А, 19-А, 29-А, 32-А, 52-А, 74-А, 76-А, 79-А].

10. Барои вақтҳои хоси релаксатсия, коэффитсиентҳои соиши дохилӣ, ҳаракатпазирӣ, диффузия, термодиффузия, часпакиҳои лағжишӣ ва ҳаҷмӣ моеҳои бисёратома ифодаҳои аналитикӣ таҳия карда шуда, бо истифода аз потенциали Адҳамов-Часовских барои моеҳои ғайрикутбӣ ва потенциали Штокмайер барои моеҳои кутбӣ, вобастагии ин бузургӣҳо аз температура ва зичӣ дар нитроген, оксиген, аммиаки моеъ ва об ҳисоб карда шудаанд. Натиҷаҳои ҳисобкунӣ бо маълумоти таҷрибавӣ муқоиса карда шуда, муқаррар карда шудааст, ки натиҷаҳои диссертатсия хосиятҳои параметрҳои динамикии интиқоли моеҳои бисёратомро дар соҳаи температураҳои паст ва зичии баланд (дар соҳаи моеҳо) беҳтар ифода мекунанд. [22-А, 24-А, 18-А, 29-А, 32-А, 52-А, 75-А,]

11. Бо усулҳои термодинамикӣ табиати аномалии қисматҳои тамоилии параметрҳои мувозинатии гармофизикии моеъкристалҳои нематикӣ (МКН) таҳқиқ карда шудаанд. Барои қонуниятҳои вобастагии параметри тартиби тамоилӣ, ҷаҳишҳои гармиғунҷоиш ва таъзиқпазирӣ ифодаҳои аналитикие ҳосил карда шудаанд, ки вобастагии онҳоро аз температура ва фишор бо назардошти саҳми тартиби тамоилии дур ва флуктуатсияи тартиби тамоилӣ муайян мекунанд. Нишон дода шудааст, ки табиати аномалии бузургӣҳои гармофизикии МКН дар фосилаҳои дуртар аз нуқтаи табдили фазаӣ тавассути тартиби тамоилии дур ва дар атрофи нуқтаи табдили фазаӣ тавассути флуктуатсияи тартиби тамоилӣ муайян карда мешаванд. [25-А, 16-А, 18-А, 29-А, 66-А, 68-А, 70-А, 71-А, 82-А, 84-А].

12. Дар доираи ансамбли статистикуи мувозинатӣ - локалии дар диссертатсия таҳия карда шуда, барои ҷузъҳои таркибии қисми мутаасилии гармиғунҷоиши МКН ифодаҳои молекулавии амиқ дарёфт шудаанд. Бо истифода аз он барои гармиғунҷоиши МКН ифодаи умумие пешниҳод шудааст, ки вобастагии гармиғунҷоиши МКН-ро аз температура ва фишор ҷӣ дар фазаи нематикӣ ва ҷӣ дар фазаи изотропӣ дуруст ифода менамояд. Яке аз имкониятҳои мавҷудияти тартиботи наздики тамоилӣ (short order) дар фазаи изотропии МКН баррасӣ шудааст. [25-А, 66-А, 70-А, 71-А, 72-А, 82-А, 84-А]

13 . Бо усулҳои термодинамикӣ ва молекулавӣ-статистикӣ хосиятҳои чандирии тамоилии МКН таҳқиқ карда шудаанд. Вобастагии модулҳои чандирии тамоилии МКН аз температура ва фишор ҳангоми деформатсияҳои навъи қатшавии амудӣ (splay), тобхӯрӣ (torsion) ва қатшавии арзӣ (bend) тавассути ифодаҳои бо усулҳои термодинамикӣ ва молекулавӣ-статистикӣ ёфташуда, ҳисоб карда шудаанд. Натиҷаҳои ҳисобкунии ҳар ду усул бо якдигар ва бо маълумоти таҷрибавӣ пурра мувофиқат мекунанд. [66-А, 70-А, 71-А, 73-А, 78-А, 84-А].

14. Бо истифода аз потенциалҳои таъсири байнимолекулавии Майер-Заупе ва Макмиллан қонунияти вобастагии вақти релаксатсияи чархиш, коэффитсиентҳои соиши дохилии чархиш, ҳаракатпазирии чархишӣ, диффузия ва термодиффузияи чархишӣ, часпакиҳои тамоилӣ, инчунин модулҳои чандирии бо онҳо мувофиқ барои ПАА (п-азоксианизол) аз ҳарорат, зичӣ ва фишор таҳқиқ карда шудаанд. Натиҷаҳои ёфта шуда барои таҳлили хосиятҳои анизотропии коэффитсиентҳои интиқол дар МКН тақмил дода шудаанд. [26-А, 40-А, 45-А, 49-А, 52-А, 56-А, 64-А, 69-А, 80-А, 85-А].

15. Қонунияти дисперсияи басомадии параметрҳои интиқол ва табиати онҳо дар рӯйдодҳои динамикии басомадашон ниҳоят паст ва ниҳоят баланд таҳқиқ карда шудаанд. Нишон дода шудааст, ки дар рӯйдодҳои динамикии пастбасомад хосиятҳои интиқолии моеъҳо бо қиматҳои пастбасомади коэффитсиентҳои интиқол тавсиф дода шуда, муодилаҳои интиқол, муодилаи дифференсиалии тартиби дууми навъи параболӣ ва механизми интиқол диффузионӣ мебошанд.

Дар рӯйдодҳои динамикии баландбасомад хосиятҳои интиқоли моеъҳо бо қиматҳои баландбасомади модулҳои чандирӣ тавсиф карда шуда, муодилаи интиқол, муодилаи дифференсиалии тартиби дууми навъи гиперболӣ ва механизми интиқол мавҷӣ мегардад. [14-А, 21-А, 29-А, 32-А, 54-А, 59-А, 60-А, 83-А, 86-А].

ТАВСИЯҲО. Амсилаи пешниҳодшудаи нисбатан умумии моеъҳо, ки аз молекулаҳои якхелаи саҳти шаклашон дилхоҳ иборатанд барои таҳқиқи хосиятҳои гармофизикии мувозинатӣ ва ғайримувозинатии моеъҳои гуногун истифода шуда метавонанд.

Ифодаи барои таҳлили моеъҳои асимметрӣ тақмилдодашудаи ФТГ ва системаи сарбастаи муодилаҳои гидродинамикаи умумикардашудаи дар асоси он таҳияшуда, метавонанд барои таҳқиқи падидаҳои динамикии интиқол дар моеъҳои мураккаб татбиқ карда шаванд.

Ифодаҳои бо назардошти хусусиятҳои соҳти моеъҳо содакардашуда, на танҳо барои таҳқиқи падидаҳои динамикии интиқол дар моеъҳои якатомаю бисёратома ва моеъкристалҳои нематикӣ имконият медиҳанд, инчунин барои пешгӯии намудани хосиятҳои нави ба ғайрисферӣ будани молекулаҳо алоқаманд, мусоидат менамоянд.

Маводи рақамӣ ва графיקии дар диссертатсия пешниҳодшуда метавонанд барои тафсир, асосноккунӣ ва экстраполятсияи маълумоти назариявӣ таҷрибавӣ оид ба хосиятҳои динамикии параметрҳои интиқол дар моеъҳо истифода шаванд.

Муодилаҳо ва ифодаҳои аналитикии дар диссертатсия ҳосилшуда, метавонанд барои муайян ва ҳисоб кардани ҳам параметрҳои термофизикии мувозинатӣ ва ҳам параметрҳои динамикии моеъҳо дар шароитҳои гуногун истифода шаванд.

Қиматҳои ададии бузургҳои гармофизикӣ ва коэффитсиентҳои динамикии интиқол дар моеъҳои гуногун, ки барои соҳаи васеи тағирёбии параметрҳои термодинамикии ҳолат ва басомади таъсири беруна дар диссертатсия оварда шудаанд ҳамчун ҳазинаи маълумот нисбати қиматҳои ин бузургҳо дар шароитҳои додашуда дар моеъҳои мувофиқ, истифода шуда метавонанд;

Вобастагии дар диссертатсия барқарор кардашудаи байни параметрҳои термофизикии коэффитсиентҳои динамикии интиқоли моеъҳо бо шакл, андоза, масса ва энергияи таъсири мутақобилаи молекулаҳои он, метавонанд ҳамчун асоси физикии ҳосил намудани маводҳои нави моеъ, ки дорои хосиятҳои зарурии гармофизикӣ ва дигар хосиятҳои физикию техникӣ мебошанд, истифода шаванд.

Маълумоти дар диссертатсия оварда шуда барои докторантҳо, аспирантҳо, унвонҷӯён, магистрон ва донишҷӯёни курсҳои болоии ихтисосҳои физикӣ, физикию химиявӣ ва технологӣ, Ҳангоми хондани курсҳои махсус, иҷрои рисолаҳои дипломию илмӣ муфид бошанд.

Амсила, усул ва натиҷаҳои умумии аналитикии дар диссертатсия оварда шуда барои тадқиқоти наву васеътар дар самти омӯзиши хосиятҳои ғайримувозинатии моеъҳои гуногун замина шуда метавонанд.

Калидвожаҳо: назарияи молекулавӣ-статистикӣ, ҳодисаҳои интиқолӣ, падидаҳои релаксатсионӣ, диффузия, часпакию чандирӣ, моеъҳои сода ва бисёратома, моеъкристаллҳои нематикӣ.

ИНТИШОРОТ ДАР МАВЗӢИ ДИССЕРТАТСИЯ

Дар мавзуи диссертатсия 86 қорҳои илмӣ нашр шудаанд, ки 32-тоашон дар маҷаллаҳои тақризшаванда мебошанд.

Нашр дар маҷаллаҳои тақризшаванда

1–М. Абдурасулов, А.А. О неравновесной статистической функции распределения асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов. // Доклады Академии наук Республики Таджикистан. –1998. –Т. XLI, №3–4. – С.36–41.

2–М. Абдурасулов, А.А. Об уравнениях обобщенной гидродинамики асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов // Доклады Академии наук Республики Таджикистан. –1999. – Т. XLII, №10. С. 42–45.

3–М. Абдурасулов, А.А. К статистической теории явления диффузии в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Нормуродов, Ф.К. Муродов // Вестник педагогического университета (сер. ест. наук). – 1999. №7. С. 46–51.

4–М. Абдурасулов, А.А. К теории динамических диффузионных процессов в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф.К. Муродов // Доклады Академии наук Республики Таджикистан. –2002. –Т.XLV, №10. – С. 12–16.

5–М. Абдурасулов, А.А. Об асимптотических поведении коэффициентов самодиффузии в асимметричных жидкостях. [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Нормуродов, Ф. Муродов // Вестник педагогического университета (сер. ест. наук). – 2002. - №3. – С. 30–33.

6–М. Абдурасулов, А.А. К статистической теории динамических вязкоупругих процессов в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов // Докл. АН РТ, 2002 г., т. XLV, № 9, с. 36–41.

7–М. Абдурасулов, А.А. До статистичної теорії динамічних процесів у молекулярних рідинах. [Текст] / А.А. Абдурасулов // Вісник Київського нац. Унів. ім. Т. Шевченка (сер. Фізика). - 2002, №4, с. 52–56.

8–М. Абдурасулов, А.А. К теории динамических диффузионных процессов в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Муродов Ф. // Докл. АН РТ. – 2002. – 45, №10. – С. 12–16.

9–М. Абдурасулов, А.А. О вязкоупругих коэффициентах асимметричных жидкостей при динамических процессах [Текст] / А.А. Абдурасулов, А Рахими // Докл.

АН РТ. – 2003. Т. XLVI, № 10. – С. 18–22.

10–М. Абдурасулов, А.А. К статистической теории релаксационных процессов в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, С. Одинаев, Ф. Муродов // Украинский физический журнал. – 2005. – Т.15, №7. – С. 669 – 677.

11–М. Абдурасулов, А.А. К статистической теории явлений переноса и релаксации в асимметричных жидкостях [Текст] / А. Рахими, Н.Б. Шохайдаров // Вестник Таджикского национального университета (научный журнал).-2006. Т.31, №5- С.103–108.

12–М. Абдурасулов, А.А. К молекулярной теории динамических процессов массопереноса в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов //Вестник технического университета. 2008. – №1. – С. 18 – 23.

13–М. Абдурасулов, А.А. Общие формулы для коэффициентов переноса и соответствующие им модулей упругостей в жидкостях с молекулами произвольной формы [Текст] / А.А. Абдурасулов, М.И. Салахутдинов //Жидкие кристаллы и их практическое использование. – 2009. – вып. 4 (30). – С. 26–36.

14–М. . Абдурасулов, А.А. Исследование частотной дисперсии сдвиговой вязкости жидкого азота и кислорода в зависимости от плотности и температуры [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов, Х.М. Мирзоаминов, Д.М. Акдодов //Доклады НАН Таджикистана. –2011. – Том 54. – №7. – С.549 - 555.

15–М. Abdurasulov, A.A. Dispersion of dynamic modules of elasticity of simple liquids for different types of decay of flow relaxations [Текст] / S. Odinaev, A.A. Abdurasulov // Journal of Molecular Liquids. – 2012. – N 176. – PP. 79–85.

16–А. Абдурасулов, А.А. Изучение законов соответственных состояний вязких свойств простых жидкостей [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов, Д.М. Акдодов, Х.М. Мирзоаминов // Доклады НАН Таджикистана. –2012. –Том 55. – №2. – С. 126 –131

17–М. Абдурасулов, А.А. Исследование коэффициентов сдвиговой и объемной вязкости многоатомных жидкостей в зависимости от параметров состояния [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов // Укр.физ.журн. – 2013. – Т. 58, №9. – С.827–835.

Abdurasulov, A. Research of the Shear and Volume viscosity coefficients in multiatomic Liquids and their dependences on the state Parameters [Текст] / S. Odinaev, A.A. Abdurasulov // Ukr. J. Phys.–2013. –Vol. 58, No 9. – PP. 827–835.

18–М. Абдурасулов, А.А. Изучение закона соответственных состояний вязких свойств классических жидкостей [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов // Теплофизика высоких температур. – 2013.–Т.51, №4. – С. 1–8.

Abdurasulov, A. Study of the Law of Corresponding States of Viscous Properties of Classical Liquids [Текст] / S. Odinaev S., Abdurasulov A. // High Temperature. 2013. Vol. 51. No. 4, pp. 1–8

19–М. Абдурасулов, А.А. Общие аналитические выражения для динамических вязкоупругих коэффициентов жидкостей с произвольными формами молекул [Текст] / А.А. Абдурасулов // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. – 2016. – № 4(36),. – С. 19–25.

20–М. Абдурасулов, А.А. О динамических вязкоупругих свойствах некоторых простых моделей асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими, Н.Б. Шоайдаров // Вестник Тадж. Нац. Унив. – 2016. – № 1/3(200). – С. 113–116.

21–М. Абдурасулов А.А. Исследование зависимости вязкоупругих параметров жидкого аргона от плотности, температуры и частоты [Текст] /А.А. Абдурасулов, А. Рахими. // Вестник Тадж. Нац. Унив. – 2016. – № 1/3(200). – С. 83–88.

22–М. Абдурасулов, А.А. Метод неполного термодинамического потенциала

для нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, А.Д. Абдурасулов, С. Одинаев. // Политехнический вестник. Серия: интеллект, инновация, инвестиции. – 2019. – №4(48). – С.12–16.

23–М. Абдурасулов, А.А. О вкладе динамики изменении внутренних давлений в вязкоупругие свойства асимметричных жидкостей [Текст] / Н.Б. Шоайдаров, А.А. Абдурасулов, А.Д. Абдурасулов, С. Одинаев. // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция 2020. – № 4(52). – С. 20–25.

24–М. Абдурасулов, А.А. Об аномальном поведении теплоёмкости нематических жидких кристаллов при переходе в изотропную фазу [Текст] / А.А. Абдурасулов, А.Д. Абдурасулов, С. Одинаев. // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. –2020. –№ 4(52). –С.7–12.

25–М. Абдурасулов, А.А. О вкладе ближнего ориентационного и радиального порядка молекул в теплоёмкость изотропной фазы нематических жидких кристаллов [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов. // Известия НАН Таджикистана. –2022. –№2(187). – С. 37–48.

26–М. Абдурасулов, А.А. Исследование вращательных релаксационных процессов и ориентационных вязкоупругих свойств нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. –2022. –№1(57). – С.19–24.

27–М. Абдурасулов, А.А. Молекулярно–статистическое исследование ориентационных упругих свойств нематических жидких кристаллов [Текст] / С. Одинаев, Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов. // Доклады НАН Таджикистана. –2022. –Том 65. – №3–4. – С. 210–219.

28–М. Абдурасулов, А.А. О динамическом переносе массы в жидкостях с произвольными формами молекул [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. – 2022. –№4(60). – С.20–24.

29–М. Абдурасулов, А.А. О динамических вязкоупругих свойствах нематических жидких кристаллов в широком диапазоне изменения частоты возмущения [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Политехнический вестник, Серия: Интеллект. Инновация. Инвестиция. –2022. – №4(64). – С. 7–15.

30–М. Абдурасулов, А.А. О характере спектра времен релаксации в простых жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов // Доклады АН Таджикской ССР. – 1991. - Т.34, №10. – С.628–631

31–М. Абдурасулов, А.А. Об оптимальном выборе радиальной функции распределения для простых жидкостей [Текст] / А.А. Адхамов, С. Одинаев, А.А. Абдурасулов. // Докл. АН. Тадж. ССР. –1989. –Том 32. –№8. – С.521–524.

32–М. Абдурасулов, А.А. Исследование частотной дисперсии сдвиговой вязкости жидких азота и кислорода в зависимости от температуры [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов, Х.М. Мирзоаминов, Д. Акдодов // Докл. АН. РТ. –2011. –Том 54, №7. – С.549–554.

Публикации в материалах конференции и других изданиях:

33–М. Абдурасулов, А.А. Термодинамика и статистическая гидродинамика нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов. // В заключительном отчёте по теме «Исследование структуры и акустические свойства жидких кристаллов» инв. № Б.902532 14.04. 81. - ФТИ имени С.У. Умарова.– Душанбе 1981.-17 с.

34–М. Абдурасулов, А.А. Статистическая теория релаксационных процессов и явлений переноса в простых и асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов

// В заключительном отчёте по теме «Исследовать кинетические и резонансные свойства твёрдых тел (конденсированные системы) Инв. № 02860011086, ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе. - 1986. – С.122–144.

35–М. Абдурасулов, А.А. Структурная релаксация и термоупругие свойства простых жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов // В заключительном отчёте по теме «Построит микроскопическую теорию фазовых переходов в дефектных кристаллах и жидкостях при наличии внешних воздействий». ГН № 01.07.003382. ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе. - 1999. – С. 113–180

36–М. Абдурасулов, А.А. О связи поступательной и вращательной диффузии в анизотропных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов. // Тезисы доклады Республиканской конференции молодых учёных. Душанбе. – 1982. – С. 56-57.

37–М. Абдурасулов, А.А. Оиди оператори статистикийи ғайримувозинатии системаҳои асимметрии [Текст] / А.А. Абдурасулов // Фишурдаи маърузаҳои конференсияи илмӣ байналмилалӣ «Физикаи муҳитҳои конденсӣ» бахшида ба 50–солагии Донишгоҳи давлатии миллии Тоҷикистон». 24–25 июни соли 1997. ДДМТ. Душанбе. – С. 49.

38–М. Абдурасулов, А.А. Об уравнениях обобщенной гидродинамики асимметричных сред [Текст] / А.А. Абдурасулов // Тезисы доклады Международной конференции «Физика конденсированного состояния» посвящённое 70–летию академика А.А. Адхамова., 3–4 сентября 1998г. – ФТИ имени С.У. Умарова. -Душанбе. - С. 10.

39–М. Абдурасулов, А.А. О статистической теории явления самодиффузии в некоторых моделях асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов // Материалы научно–теоретической конференции профессорско–преподавательского состава ТГНУ посвященное «Дню науки». -Душанбе. - 2000.– С. 24.

40–М. Абдурасулов, А.А. О характере времён релаксации в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов // Материалы-научно–практической конференции профессорско–преподавательского состава ТГНУ посвящённое «Дню науки». – Душанбе. - 2001. – С. 32.

41–М. Абдурасулов, А.А. К статистической теории вязкоупругих процессов в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов // Тезисы доклады Международной конференции «Физики конденсированного состояния. 11–12 октября 2001г. – Душанбе. - С. 78.

42–М. Абдурасулов, А.А. О статистической теории упругих свойств асимметричных сплошных сред [Текст] / А.А. Абдурасулов // Тезисы научно–теоретической конференции посвящённое 50–летию Таджикского национального университета. - Душанбе, 1998г. – С. 56.

43–М. Абдурасулов, А.А. К статистической теории явления диффузии и релаксационных процессов в молекулярных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов // Сб. науч. трудов Налогово–правового института.–Душанбе.–2002.–№2.– С.11–16.

44–М. Абдурасулов, А.А. Молекулярная теория явления переноса и релаксации в сложных асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Нормуродов, Ф. Муродов / В сб. научных статей, посвященный 30 – летию физического факультета ТГПУ им. К. Джуроева. - Душанбе. – 2002. – С. 127–135.

45–М. Абдурасулов, А.А. Динамические процессы массопереноса в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов. // В заключительном отчёте по

теме: «Разработать способы выращивания новых сегнето-, пьезоэлектрических и сверхпроводящих кристаллов, исследовать их свойства и выдать рекомендации по их применению». ФТИ имени С.У. Умарова. - (1999–2003), ГР № 000 000 671.-Душанбе. -10 с.

46–М. Абдурасулов, А.А. О статистической теории релаксационных процессов и явлений переноса в некоторых моделях асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов. // Тезисы докладов Международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем». 5–6 октября 2004г. ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе. – С. 12.

47–М. Абдурасулов, А.А. Исследование динамических коэффициентов массопереноса в некоторых упрощенных моделях асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов // Тезисы докладов международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем». 5-6 октября 2004 г. ФТИ имени С.У. Умарова. Душанбе.- С.28–30.

48–М. Абдурасулов, А.А. О динамических коэффициентах вязкости асимметричных жидкостей [Текст] /А.А. Абдурасулов, А. Рахими А. // Тезисы докладов международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем». 5-6 октября 2004 г.-ФТИ имени С.У. Умарова. Душанбе. – С.30–31.

49–М. Adurasulov, A.A. On molecular theory of dynamic processes of mass in asymmetric liquids [Текст] / A.A. Adurasulov, S. Odinaev, F. Murodov. // Abstracts 3rd International conference Physics of Liquids matter: modern problems. May 27–31, 2005, Kyiv, Ukraine. – P.58.

50–М. Абдурасулов, А.А. О динамическом коэффициенте диффузии жидкого аргона [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов, А. Рахими. //Материалы Международной конференции «Вклады Авиценны и Эйнштейна в развитии естествознания», посвящённая 100–летию СТО Эйнштейна. 7 ноября 2005 г. Хатлонский госуниверситет имени Н. Хисрава. – Курган-Тюбе. – С.15–21.

51–М. Абдурасулов, А.А. Численный расчет значения коэффициента внутреннего трения жидкого аргона [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Муродов, А. Рахими. //Материалы Международной конференции «Вклады Авиценны и Эйнштейна в развитии естествознания», посвящённая 100–летию СТО Эйнштейна, 7 ноября 2005 г. Хатлонский госуниверситет имени Н. Хисрава. – Курган-Тюбе. – С. 21–23.

52–М. Абдурасулов, А.А. О характере вращательных релаксационных процессов в нематических жидких кристаллах [Текст] / А.А. Абдурасулов, Ф. Нормуродов, Ф. Муродов, А. Рахими. //Тезисы докладов Научно–теоретической конференции «Современные проблемы физики и астрофизики» посвящённое 100–летию СТО и 40–летию Физического факультета ТГНУ. – 2005. Душанбе. – С. 58–59.

53–М. Абдурасулов, А.А. О вкладе ориентационного взаимодействия молекул в уравнении состояния асимметричных жидкостей [Текст] /А.А. Абдурасулов, Ф. Нормуродов, Ф. Муродов, А. Рахими. // Тезисы докладов научно–теоретической конференции «Современные проблемы физики и астрофизики» посвящённое 100–летию СТО и 40–летию Физического факультета Таджикского национального университета. – 2005. – Душанбе. С.69

54–М. Абдурасулов, А.А. О частотных асимптотиках вязкоупругих коэффициентов асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими // Материалы международной конференции по физике конденсированного состояния и экологических систем, 30–31 октября 2006г. – ФТИ имени С.У. Умарова. – Душанбе. – С.50–51.

55–М. Абдурасулов, А.А. Некоторые вопросы статистической теории явлений переноса и релаксации в асимметричных жидкостях при динамических процессах [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими // Материалы II Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования в XXI веке». ч. 2. 15–16 марта 2007. - ТТУ им. ак. М.С. Осими, - Душанбе. – С. 56–60.

56–М. Абдурасулов, К статистической теории вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей. [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими, Н.Б. Шоайдаров // Материалы III Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования в XXI веке». 22–24 мая 2008 г. - ТТУ им. ак. М.С. Осими. – Душанбе. – С. 265–268.

57–М. Абдурасулов, А.А. О динамических коэффициентах переноса нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, М.И. Салахутдинов // Тезисы VII Международной конференции «Лиотропные жидкие кристаллы и наноматериалы», 22–25 сентября 2009г. - Иваново (Россия), – С. 59.

58–М. Abdurasulov, A.A. About determination of coefficient of the friction and times of the relaxation of simple liquids [Текст] / S. Odinaev, Kh. Mirzoaminov, A.A. Abdurasulov. // Abstracts International Conference Physics of Liquids matter: modern problems. May 21–24, 2010. - Kyiv, Ukraine. – P. 105.

59–М. Abdurasulov, A.A. Investigation of frequency dispersion of the viscosity coefficient of simple liquids depending on the thermodynamic parameters of a state [Текст] / S. Odinaev, A. Abdurasulov, Kh. Mirzoaminov. // Abstracts. EMLG–JMLG Annual Meeting 2010: Complex liquids. Modern trends in exploration, understanding and application. September 5–9, 2010. – L’viv, Ukraine. – PP. 38–39.

60–М. Abdurasulov, A.A. On determination of the of frequency dispersion of shear viscosity of simple liquids in dependence of nature of relaxation currents [Текст] / S. Odinaev, A. Abdurasulov, N. Sharifov. // Abstracts. EMLG/JMLG Annual Meeting: New outlook on molecular liquids; from short scale to long scale dynamics. 11–15 September 2011. - Warsaw, Poland. – P.83.

61–М. Abdurasulov, A.A. Investigation of the law of corresponding states for the viscous properties of classical liquids [Текст] / S. Odinaev, A. Abdurasulov, Kh. Mirzoaminov // Abstracts. EMLG/JMLG Annual Meeting: Molecular association in fluid faces and at fluid interfaces. 5–9 September 2012. - Eger, Hungary. P. 81

62–М. Абдурасулов, А.А. Об одном подходе в молекулярной теории динамических вязкоупругих свойств простых жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими, Н.Б. Шоайдаров. // Материалы VIII Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования», Часть – 2. 3–4 ноября 2016. - ТТУ им. ак. М.С. Осими, Душанбе. – С. 113–116.

63–М. Абдурасулов, А.А. Коэффициент внутреннего трения и исследование динамических вязкоупругих свойств простых жидкостей. [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими, Н.Б. Шоайдаров. // Известия Таджикского отделения Международной Академии наук высшей школы. Душанбе, 2016, – №1. – С. 36–42.

64–М. Абдурасулов, А.А. О вращательной вязкости нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, А. Рахими, Д.А. Абдурасулов. //Материалы VIII Международной научно–практической конференции «Перспективы развития науки и образования», Часть – 2. 3–4 ноября 2016г. - ТТУ им. акад. М.С. Осими. Душанбе. – С. 116–120.

65–М. Абдурасулов, А.А. Исследование изохорной вязкости простых моделей асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, С. Одинаев, Н.Б. Шоайдаров. // Материалы Международной конференции “Проблемы современной физики” (посв.

110 лети акад. С.У. Умарова и 90 лети ак. А.А. Адхамова). ФТИ имени С.У. Умарова. - Душанбе. – 2018. –С. 92-94.

66–М. Абдурасулов, А.А. К термодинамике жидких кристаллов вблизи точки фазового перехода нематический жидкий кристалл–изотропная жидкость [Текст] / Абдурасулов А.А., Абдурасулов Д.А., Шоайдаров Н.Б. // Научные труды Инженерной академии Республики Таджикистан. – Душанбе. – 2019. – С. 61–65.

67–М. Абдурасулов, А.А. Локальные законы сохранения и вязкоупругие свойства асимметричных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров, Д.А. Абдурасулов. // Материалы Международной научно–практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана: проблемы и пути их решения». 19 декабря 2019г. - Филиал МЭИ в г. Душанбе. – С. 250–255.

68–М. Абдурасулов, А.А. Об аномальном поведении теплофизических параметров нематических жидких кристаллов вблизи фазового перехода НЖК–ИЖ [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. // Материалы Международной научно–практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана: проблемы и пути их решения». 19 декабря 2019. - Филиал МЭИ в г. Душанбе. – С. 237–242.

69–М. Абдурасулов, А.А. К теории вращательных релаксационных процессов и динамических вязкоупругих свойств нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. //Материалы международной научно–практической конференции студентов, магистров, аспирантов и молодых учёных «Мухандис–2019». Часть 1, естественные науки. ТТУ имени академика М.С. Осими. – Душанбе. – 2019, С.78–84.

70–М. Абдурасулов, А.А. О связи термических и калорических параметров нематических жидких кристаллов вблизи точки фазового перехода НЖК–ИЖ [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. //Материалы научно–практической конференции «Современные проблемы физики конденсированного состояния и ядерной физики». 19 февраля 2020 г. -Таджикский национальный университет. - Душанбе. – С.106–109.

71–М. Абдурасулов А.А. О вкладе флуктуации ориентационного порядка в аномальном поведении теплоёмкости нематических жидких кристаллов [Текст] /А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. // Материалы научно–практической конференции на тему «Современные проблемы физики конденсированного состояния и ядерной физики» 19 февраля 2020 г., -Таджикский национальный университет. - Душанбе. – С.110–113.

72–М. Абдурасулов, А.А. К молекулярной теории теплоёмкости изотропной фазы нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров, Д.А. Абдурасулов. //Материалы Международной научно–практической конференции «Электроэнергетика Таджикистана. Проблемы энергосбережения, энергоэффективности и использования возобновляемых источников энергии». 29–30 апреля 2021г. – филиал МЭИ в г. Душанбе. - С.312–317.

73–М. Абдурасулов, А.А. Исследование зависимости коэффициентов ориентационной деформации нематических жидких кристаллов от температуры и давления [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров. //Материалы международной научно–практической конференции «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития», часть 1. 12–13 ноября 2021г. - ТТУ им. акад. М.С. Осими. -Душанбе. – С.158–161

74–М. Абдурасулов, А.А. Релаксационные процессы и динамические вязкоупругие свойства неполярных жидкостей [Текст] /А.А. Абдурасулов Д.А. Абдурасулов, С. Одинаев. // Материалы международной научно–практической конференции «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития» Часть 1. 12–13 ноября 2021 г.- ТТУ им. ак. М.С. Осими. – Душанбе. – С.110–113.

75–М. Абдурасулов, А.А. О вкладе перекрёстных релаксационных процессов в динамические вязкоупругие свойства полярных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров // Материалы международной научно–практической конференции. «Технические науки и инженерное образование для устойчивого развития». Часть–1. Естественные и гуманитарные науки. 12–13 ноября 2021г. - ТТУ им. ак. М.С. Осими. – Душанбе. – С. 180–186.

76–М. Абдурасулов, А.А. Исследование термических релаксационных процессов в многоатомных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров, Д.А. Абдурасулов. //Материалы Республиканской научно–практической конференции “Наука–основа инновационного развития”. Раздел фундаментальные науки. ТТУ им. ак. М.С. Осими. - Душанбе. –2022. – С.298–302.

77–М. Абдурасулов А.А. Статистическое описание динамических вязкоупругих свойств жидкостей с произвольными формами молекул. 1. Жидкие системы со сферическими молекулами [Текст] / С. Одинаев, А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов. //Материалы VIII Международной конференции «Современные проблемы физики». 21–22 октября 2022г.- ФТИ имени С.У. Умарова. - Душанбе, – С. 22–27.

78–М. Абдурасулов, А.А. Статистическое описание динамических вязкоупругих свойств жидкостей с произвольными формами молекул. 2.Простые модели нематических жидких кристаллов [Текст] / С, Одинаев, Д.А. Абдурасулов, А.А. Абдурасулов. //Материалы VIII Международной конференции «Современные проблемы физики». 21–22 октября 2022г.- ФТИ имени С.У. Умарова. - Душанбе, – С. 30–35.

79–М. Абдурасулов, А.А. К статистической теории динамических вязкоупругих свойств многоатомных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров, Д.А. Абдурасулов. // Материалы VIII Международной конференции «Современные проблемы физики», 21-22 октября 2022г.-ФТИ имени С.У.Умарова. -Душанбе, -С.134–139.

80–М. Абдурасулов, А.А. О вкладе давления в динамические вязкоупругие свойства нематических жидких кристаллов [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Р.С. Яздонкулов, В.Т. Бехбудов. //Материалы VIII Республиканской научно–практической конференции «Наука основа инновационного развития», , апрель 2023г. - ТТУ им. акад. М.С. Осими. – Душанбе. - С. 78–83.

81–М. Абдурасулов, А.А. О связи коэффициентов диффузии и внутреннего трения в жидкостях с произвольными формами молекул [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Ф.Р. Азизуллоев. // Материалы VIII Республиканской научно–практической конференции «Наука основа инновационного развития». апрель 2023г. - ТТУ им. акад. М.С. Осими,– Душанбе. - С.74–78.

82–М. Абдурасулов, А.А. О температурной зависимости теплоёмкости нематических жидких кристаллов в окрестности точки фазового перехода НЖК–ИЖ [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров. // Материалы научно–практической конференции «Развитие и достижения физической науки в годы независимости». 25-26 августа 2023г. -ФТИ им. С.У.Умарова. – Душанбе. – С.40–43.

83–М. Абдурасулов, А.А. Частотная дисперсия динамических вязкоупругих коэффициентов многоатомных жидкостей [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А.

Абдурасулов, Н.Б. Шоайдаров. // Тезисы международной конференция «Современные технологии научного приборостроения и информационно–измерительных систем», 23 июня 2023г. - Научно–технологический центр уникального приборостроения Российской Академии наук. - Москва – С. 188–189.

84–М. Абдурасулов А.А. О температурной зависимости теплоёмкости нематических жидких кристаллов в изотропной окрестности точки фазового перехода НЖК – ИЖ [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов // Тезисы международной конференция «Современные технологии научного приборостроения и информационно–измерительных систем», 23 июня 2023г. - Научно–технологический центр уникального приборостроения Российской Академии наук. - Москва с. 186–187.

85–М. Абурасулов А.А. О вкладе движении центра инерции молекул нематических жидких кристаллов в диффузионном переносе массы [Текст] / А.А. Абдурасулов, Д.А. Абдурасулов, Ф.Р. Азизуллоев. // Материалы Международной научной конференции «Физические и технические науки в пространстве СНГ». Душанбе, ФТИ им. С.У. Умарова. 29–30 ноября 2024г.– С. 24–29.

86 – М. Абдурасулов, А.А. О диффузионно-волновых механизмах переноса массы в асимметричных жидкостях [Текст] / А.А. Абдурасулов // Мат.14 Международной теплофизической школы (МТФШ-14) «Теплофизические исследования возобновляемая энергетика». 9-10 декабря 2024г. ТТУ им. ак. М.С. Осими.-Душанбе. – С. 139-143.

АННОТАЦИЯ

диссертации Абдурасулова Анвара Абдурасуловича на тему «Статистическая теория релаксационных явлений и динамических процессов переноса в жидкостях с произвольными формами молекул», представленной на соискание учёной степени доктора физико-математических наук, по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

Ключевые слова: молекулярно-статистическая теория, явление переноса, релаксационные процессы, диффузия, вязкоупругость, асимметричные жидкости, нематические жидкие кристаллы.

Основной целью диссертации является построение последовательной, внутренне согласованной молекулярно-статистической теории явлений переноса и релаксации в сложных жидких системах, состоящих из жёстких молекул произвольной формы, на основе обобщения метода неравновесной функции распределения (НФР).

Объектами исследования являются сложные асимметричные жидкие системы, состоящие из одинаковых жёстких молекул произвольной формы.

Предметами исследования являлись теоретические исследования и аналитические описания закономерностей зависимости основных параметров переноса и релаксации в сложных жидких системах, от изменения термодинамических параметров состояния и частоты внешнего возмущения в общем виде и для конкретных классов жидкостей.

Научная новизна полученных результатов.

Предложена более общая, чем модель простых жидкостей, состоящая из упругих сферических молекул, модель сложных жидкостей, состоящая из одинаковых жёстких молекул произвольной формы. Метод НФР **обобщён** для описания динамических процессов переноса и релаксационных явлений в сложных асимметричных жидкостях.

Получена замкнутая компактная система уравнений обобщённой гидродинамики позволяющая описать термические релаксационные явления и динамические процессы переноса массы, импульса и момента импульса в сложных асимметричных жидкостях.

Упрощённые, с учётом особенности молекулярной структуры конкретного класса жидкостей, уравнения обобщённой гидродинамики, **использована** для описания релаксационных явлений и динамических процессов переноса массы, импульса и момента импульса в простых одноатомных жидкостях, в полярных и неполярных многоатомных жидкостях, а также в нематических жидких кристаллах.

Определена закономерность релаксационной корреляции трансляционных и вращательных потоков переноса, **выявлены** связанные с несферичностью молекулы дополнительные коэффициенты переноса.

Показано, что механизм переноса в жидкостях, при низкочастотных динамических процессах является диффузионным, а при высокочастотных процессах, волновым.

Возможности использования результатов. **Полученные** в диссертации аналитические выражения и формулы могут быть использованы для определения и расчёта, как равновесных, так и динамических теплофизических параметров жидкостей, при различных условиях эксплуатации. **Выявленная** в диссертации связь теплофизических параметров и динамических коэффициентов переноса жидкостей с формой, размером, массой и энергией взаимодействия молекул, могут быть использованы, как физическая основа создания новых жидких материалов с заданными теплофизическими и другими физико-техническими свойствами. **Приведённые** в диссертации результаты численных расчётов значений теплофизических и переносных параметров жидкостей, могут быть использованы, как база данных о значениях этих параметров при соответствующих условиях применения этих жидкостей;

ШАРҲИ МУХТАСАРИ

диссертатсияи Абдурасулов Анвар Абдурасулович дар мавзӯи “Назарияи статистикийи ҳодисаҳои релаксационӣ ва рӯйдодҳои динамикийи интиқол дар моеъҳои молекулаҳояшон шакли дилхоҳ дошта”, ки барои дарёфти дараҷаи илмӣ доктори илмҳои физика ва математика аз рӯйи ихтисоси 01.04.02 – Физикаи назариявӣ пешниҳод шудааст

Вожаҳои калидӣ: назарияи молекулавӣ-статистикӣ, ҳодисаҳои интиқолӣ, падидаҳои релаксационӣ, диффузия, часпакию чандирӣ, моеъҳои асимметрӣ, моеъкристаллҳои нематикӣ.

Мақсади асосии диссертатсия дар асоси тақмили усули функсияи ғайримувозинатии тақсимои молекулаҳо таҳия намудани назарияи молекулавӣ-статистикийи муқамалро пайдарпай ва мантиқан алоқаманди падидаҳои интиқолу релаксатсия дар моеъҳои молекулаҳояшон шакли дилхоҳ дошта, мебошад

Объекти таҳқиқот моеъҳои мураккаби асимметрии молекулаҳояшон саҳти шаклашон дилхоҳ, мебошад.

Предмети таҳқиқот омӯзиши назариявӣ ва таҳқиқи аналитикийи қонуниятҳои вобастагии бузургҳои асосии интиқолу релаксатсия дар моеъҳои мураккаб, аз тағйирёбии параметрҳои термодинамикийи ҳолат ва басомади ошубҳои беруна дар шакли умумӣ ва барои гуруҳҳои алоҳидаи моеъҳо, мебошад

Навгонии натиҷаҳои ҳосилшуда.

Амсилаи аз амсилаи моеъҳои содаи аз молекулаҳои курашакли чандирӣ иборат буда дида умумитари моеъҳои шакли молекулаҳояшон дилхоҳ пешниҳод шудааст. **Усули НФР** барои таҳқиқи падидаҳои динамикийи интиқол ва релаксатсия дар моеъҳои мураккаби асимметрӣ тақмил дода шудааст.

Манзумаи суфтаю сарбастаи **муодилаҳои гидродинамикаи умумикардашуда** барои омӯхтани релаксатсияҳои термикӣ, рӯйдодҳои динамикийи интиқоли масса, импульс ва моменти импульс дар моеъҳои мураккаби асимметрӣ таҳия карда шудаанд.

Муодилаҳои бо назардошти хусусиятҳои хоси сохтори моеъҳои мушаххас содакардашудаи гидродинамикаи умумикардашуда, барои таҳқиқи падидаҳои релаксационӣ ва рӯйдодҳои динамикийи интиқоли масса, импульс ва моменти импульс дар моеъҳои содаи якатома, моеъҳои бисёратомаи кутбӣ ва ғайрикутбӣ, инчунин дар меъкристаллҳои нематикӣ, истифода шудаанд.

Қонуниятҳои алоқамандии релаксационии селҳои транслясионӣ ва чархишии интиқол муайян карда шуда, дар заминаи ғайрисферӣ будани молекулаҳо ҳосилшавии коэффисиентҳои иловагии интиқол, ошкор карда шудааст.

Нишон дода шудааст, ки механизми интиқол дар моеъҳо ҳангоми рӯйдодҳои динамикийи пастбасомад диффузионӣ буда, ҳангоми рӯйдодҳои динамикийи баландбасомад мавҷӣ мешавад.

Имкониятҳои истифодаи амалии натиҷаҳо. Ифодаҳои аналитикӣ ва формулаҳои дар диссертатсия ҳосил карда шуда, барои омӯзиш ва ҳисобу китоби бузургҳои гармофизикии ҳолатҳои мувозинатӣ ва ғайримувозинатии моеъҳои гуногун истифода шуда метавонанд. Робитаи дар диссертатсия барқарор кардашудаи бузургҳои гармофизикӣ ва коэффисиентҳои динамикийи интиқоли моеъҳо бо шакл, андоза, масса ва энергияи таъсири мутақобилаи молекулаҳо, ҳамчун заминаи физикии ҳосилкунии моеъҳои нави хосиятҳои дилхоҳи гармофизикӣ ё дигар хосиятҳои физикию техникӣ дошта, истифода шуда метавонанд.

Натиҷаи ҳисобкунии адабии дар диссертатсия овардашудаи қиматҳои параметрҳои гармофизикӣ ва интиқолии моеъҳо, метавонанд ба сифати ҳазинаи маълумот доир ба қиматҳои ин бузургҳо дар шароитҳои гуногуни татбиқи моеъҳо, истифода шаванд.

ANNOTATION

Dissertation by Abdurassulov Anvar Abdurassulovich on the topic **"Statistical Theory of Relaxation Phenomena and Dynamic Transport Processes in Liquids with Arbitrary Molecular Shapes,"** submitted for the degree of Doctor of Physical and Mathematical Sciences in the specialty 01.04.02 – Theoretical Physics.

Keywords: Molecular-statistical theory, transport phenomena, relaxation processes, thermal relaxation, structural relaxation, diffusion, viscoelastic parameters, simple and polyatomic liquids, nematic liquid crystals.

The main objective of the dissertation is to develop a consistent and internally coherent molecular-statistical theory of transport and relaxation phenomena in complex liquid systems composed of rigid molecules with arbitrary shapes, based on the generalization of the non-equilibrium distribution function (NDF) method.

The objects of study are complex asymmetric liquid systems composed of identical rigid molecules of arbitrary shape.

The subjects of study are theoretical investigations and analytical descriptions of the regularities governing the dependence of fundamental transport and relaxation parameters in complex liquid systems on variations in thermodynamic state parameters and the frequency of external perturbations, both in general form and for specific classes of liquids.

Scientific Novelty of the Results Obtained

A more general model of complex liquids, consisting of identical rigid molecules of arbitrary shape, is proposed as an alternative to the simpler model of liquids composed of elastic spherical molecules. The NDF method has been extended to describe dynamic transport processes and relaxation phenomena in complex asymmetric liquids.

A closed and compact system of generalized hydrodynamic equations has been derived, enabling the description of thermal relaxation phenomena and dynamic transport processes of mass, momentum, and angular momentum in complex asymmetric liquids.

Simplified versions of the generalized hydrodynamic equations, adapted to the molecular structure of specific classes of liquids, have been used to describe relaxation phenomena and dynamic transport processes in simple monatomic liquids, in polar and nonpolar polyatomic liquids, as well as in nematic liquid crystals.

The regularities of relaxation correlation between translational and rotational transport fluxes have been determined, and additional transport coefficients associated with molecular nonsphericity have been identified.

It has been demonstrated that in liquids, the transport mechanism follows a diffusive nature in low-frequency dynamic processes and a wave-like nature in high-frequency processes.

Practical Applications of the Results

The analytical expressions and formulas obtained in the dissertation can be used to determine and calculate both equilibrium and dynamic thermophysical parameters of liquids under various operating conditions. The established relationship between the thermophysical parameters and dynamic transport coefficients of liquids with molecular shape, size, mass, and interaction energy can serve as a physical basis for designing new liquid materials with specific thermophysical and other physicochemical properties. The numerical calculations of thermophysical parameters presented in the dissertation can serve as a database for these parameters under relevant application conditions.