

ТАДЖИКСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

УДК.5.32.7. + 532.783



Баладджонзода Сулаймонджони Додарджон

**Исследование вязкоупругих и акустических свойств
квазисферических и полярных жидкостей**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени доктора
философии (PhD)-доктора по специальности 6D060400-Физика
(6D060402-Теоретическая физика)

Душанбе-2025

Диссертация выполнена на кафедре теоретической физики
Таджикского национального университета.

**Научный
руководитель:** **Акдонов Донаёр Мавлобахшович** – доктор
физико-математических наук, доцент, зав.
кафедрой общей физики Таджикского
национального университета.

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

Абдурахмонов Абдурахмон Абдулкадимович -
кандидат физико-математических наук, старший
преподаватель кафедры теоретической физики
Таджикского государственного педагогического
университета имени С. Айни.

**Ведущая
организация:** Таджикский технический университет имени
академика М.С. Осими.

Защита диссертации состоится «20» января 2026 года, 14:00 часов
на заседании диссертационного Совета 6D.KOA-056 при Таджикском
национальном университете по адресу: 734025, РТ, г. Душанбе, поселок
Буни Хисорак, учебный корпус №16, физический факультет, 206
аудитория.

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

Автореферат разослан « ____ » _____ 2025 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета 6D.KOA-056, к.ф.м.н, доцент  Исломов З.З.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

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

Полярными называют жидкости, в молекулах которых существует разделение зарядов, то есть дипольный момент. Такое разделение возникает из-за того, что электроны в ковалентных связях распределяются между атомами неодинаково. Полярность жидкостей определяется пространственной структурой их молекул. В технических и природных средах жидкости испытывают влияние различных внешних факторов, что часто приводит к нарушению их динамического равновесия. Исследования показывают, что при высокоскоростных воздействиях жидкости ведут себя иначе, чем в стабильных условиях или в условиях медленного воздействия. Например, их вязкоупругие и акустические характеристики отличаются от условий медленных или равновесных процессов. Поведение упомянутых характеристик определяется, как характером внешнего частотного воздействия, так и особенностями течения релаксационных процессов в самой жидкости. Поэтому для адекватного теоретического описания динамических свойств полярных и многоатомных жидкостей, учитывающего их молекулярную структуру и внутренние релаксационные процессы, необходимо использовать строгие методы статистической теории жидкого состояния. Такие исследования позволяют более глубоко понять механизмы, определяющие динамическое поведение жидкостей. Поэтому одной из ключевых задач теории жидкого состояния является применение молекулярно-кинетического подхода к динамическим явлениям и раскрытие природы внутренних релаксационных процессов и установление закономерностей их влияния на и частоты внешнего воздействия динамические вязкостные, упругие и акустические свойства, как многоатомных, так и полярных жидкостей в зависимости от частоты внешнего воздействия и термодинамических параметров состояния. Эта задача является основным направлением настоящего исследования и основой для дальнейших научных разработок в данной области.

Основной целью работы является развитие и применение метода кинетического уравнения для исследования динамических вязкостных и акустических характеристик полярных и многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами. В процессе исследования принимались во

внимание угловые ориентации сложных молекул, а также влияние внутренних релаксационных процессов, происходящих в жидкостях в широком диапазоне изменений термодинамических параметров и частоты внешних воздействий. Это позволяет более точно оценить их поведение и взаимодействие на молекулярном уровне, учитывая не только структурные особенности, но и динамику их внутренних состояний.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие **основные задачи исследования:**

- получение аналитических выражений для динамических модулей упругости и коэффициентов вязкости жидкостей с учётом релаксационных процессов при условии диффузионного или экспоненциального затухания тензора напряжений;

- выбор равновесных потенциала межчастинного взаимодействия, модельно-теоретической радиальной функции распределения и коэффициента трения для многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами и полярных жидкостей;

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

- исследование частотной дисперсии акустических параметров многоатомных и полярных жидкостей с учетом природы затухания релаксирующих потоков и оценка влияния типа механизма релаксации на их акустическое поведение;

- проведение численных расчетов скорости распространения и коэффициента поглощения акустических волн в широком диапазоне изменений плотности, температуры и частоты для многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами и полярных жидкостей.

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

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

Теоретический аппарат исследования включает в себя методы кинетического уравнения, численных расчетов с применением современных компьютерных программных средств, а также другие подходы, позволяющие моделировать и анализировать динамические и акустические свойства жидкостей. Перечисленные методы позволяют корректно вычислять любые

задаваемые параметры и детально исследовать их зависимости от различных внешних и внутренних факторов.

Научная новизна исследования заключается в том, что впервые:

-**проведены** численные расчёты коэффициента трения β , времен релаксации τ и τ_0 в зависимости от плотности, температуры и ориентации для квазисферических и полярных жидкостей при выборе потенциала межмолекулярного взаимодействия (потенциалов Ленард-Джонса и Штокмайера) и учёте модельных аспектов радиальной функции распределения молекул;

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

-**установлено**, что при исследовании частотных зависимостей в области низких частот ($\omega\tau \ll 1$), характерной для диффузионного затухания, объёмный модуль упругости $K(\omega)$ стремится к адиабатическому пределу K_S , а сдвиговой модуль упругости $\mu(\omega)$ убывает по закону $\sim \omega^{\frac{3}{2}}$; коэффициенты вязкости $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$ в этом режиме приближаются к своим статическим значениям η_s и η_v по закону $\sim \omega^{\frac{1}{2}}$; в высокочастотной области ($\omega\tau \gg 1$) напротив, наблюдается спад вязкостей $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$ пропорционально $\sim \omega^{-1}$, при этом значения модулей упругости $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ становятся независимыми от частоты и соответствуют высокочастотным пределам, определённым теорией Цванцига;

-**показано**, что при низких частотах ($\omega\tau \ll 1$) и экспоненциальном механизме релаксации модули упругости $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ стремятся к асимптотическим значениям, а коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей $\eta_s(\omega)$, $\eta_v(\omega)$ сохраняют статический характер (η_s и η_v). В области высоких частот ($\omega\tau \gg 1$) модули $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ становятся постоянными, а коэффициенты вязкостей $\eta_s(\omega)$, $\eta_v(\omega)$ убывают по закону $\sim \omega^{-2}$, что согласуется с положениями общей релаксационной теории;

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

-**определено**, что ширина частотной дисперсии скорости распространения и коэффициента поглощения акустических волн в жидкостях с квазисферическими молекулами и полярных жидкостях определяется характером затухания релаксирующих потоков: при диффузионном законе наблюдается более широкая область дисперсии ($\sim 10^5$ Гц), а при экспоненциальном затухании область существенно сужается $\sim 10^2$ Гц, что

соответствуют акустическим данным, а также результатам общей релаксационной теории;

Защищаемые положения:

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

-закономерности поведения объёмного $K(\omega)$ и сдвигового $\mu(\omega)$ модулей упругости, коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей в низкочастотной и высокочастотной областях;

-асимптотическое поведение модулей объёмной $K(\omega)$ и сдвиговой $\mu(\omega)$ упругостей и статический характер сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей в областях низких и высоких частот;

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

Теоретическая и практическая значимость исследования заключается в том, что понимание вязкоупругих и акустических свойств жидкостей с квазисферическими и полярными молекулами способствует раскрытию тонкой структуры молекулярного строения в условиях внешнего возмущения. Разработка теоретических моделей, описывающих влияние молекулярной структуры и внешних факторов (угловой ориентации молекул, температуры, плотности) на акустические свойства жидкостей способствует уточнению существующих теорий вязкоупругого поведения и распространения акустических волн в полярных и квазисферических жидкостях, что является новым взглядом на физические свойства подобных систем.

Практическая значимость исследований позволяют оценить и определить численные значения вязкоупругих и акустических свойств многоатомных и полярных жидкостей при разного рода динамических воздействий. Результаты численных расчётов расширяют существующую базу данных о вязкоупругих и акустических свойствах рассмотренных типов жидкостей, что позволяет учесть их поведение в различных эксплуатационных условиях, а также установить зависимость вязкоупругих и акустических свойств этих жидкостей от их молекулярного строения и оптимизировать условия работы различных технологических цепочек и устройств. Материалы диссертации могут быть полезными студентам физических, химических и др. специальностей при выполнении дипломных и магистерских работ, соискателям, докторантам и аспирантам.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности: тема, методы исследования и предложенные научные положения, соответствуют паспорту научной специальности 6D060402-теоретическая физика (физика и математика) в части п. 1 «Теория конденсированного состояния макроскопических и микроскопических классических и квантовых систем. Изучение различных состояний вещества и физических явлений в них. Статистическая физика и кинетическая теория равновесных и неравновесных систем», в части п.

5 «Развитие теории и исследование общих свойств и законов нелинейной динамики неравновесных систем», в части п. 6 «Моделирование физических явлений».

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

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

Апробация и применение результатов диссертации. Основные результаты работы изложены на:

6th International Scientific and Practical Conference «Science, Education, Innovation: Topical Issues and Modern Aspects», 2022. (April 16-18, 2022). Tallinn, Estonia; республиканской научно-практической конференции «Взаимосвязь науки с производством в процессе ускоренной индустриализации Республики Таджикистан», Душанбе, 2022, (22-23 апреля 2022г.); республиканской научно-практической конференции «Математическое и компьютерное моделирование физических процессов», посвященной «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования». Душанбе, 2023, (9 февраля 2023г.); международной научно-практической конференции «Новые достижения в области естественных наук и информационных технологии», посвященной «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук на 2020-2040 гг.». Душанбе: изд-во «РТСУ», 2023, (30 май 2023г.); международной научно-практической конференции «Современные проблемы физики и химии полимеров», посвященной 75-летию образования Таджикского национального университета и 20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 гг.), (Душанбе, 10 октября 2023); республиканской научно-практической конференции «Проблемы и тенденции развития точных, математических и естественных наук», посвященной двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 гг.), (Душанбе, 28 мая 2024 года); республиканская научно-практическая конференция «Актуальные проблемы физики конденсированного состояния», посвященная 35-летию государственной независимости Республики Таджикистан и «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования», 80-летию профессора Шерматова М., 85-летию профессора Джамолова М. (Худжанд, 20-21 мая 2024); международной

научной конференции «Физические и технические науки в пространстве СНГ: проблемы и перспективы развития», (Душанбе, 29–30 ноября 2024); международной научно-практической конференции «Проблемы и перспективы развития физических наук», (Худжанд, 11-12 марта 2025); международной научно-практической конференции на тему «Современные проблемы физики полупроводников и диэлектриков», посвящённой 20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в 2020-2040гг» в области науки и образования и 35-летию кафедры физической электроники Таджикского национального университета (Душанбе, 30 апреля 2025).

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

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

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

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы исследования, сформулированы цели и задачи работы, дана оценка степени изученности проблемы выбраны объект и предмет исследования, выделены научная новизна, выносимые на защиту положения, теоретическая и практическая значимость исследования.

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

Вторая глава посвящена изучению вязкоупругих свойств жидкостей, где релаксирующие потоки затухают по степенному или экспоненциальному законам. Путём последовательного применения импульсных моментов двухчастичной функции распределения получено уравнение типа Смолуховского для бинарной плотности. На основе неравновесной бинарной плотности построены уравнения обобщённой гидродинамики. Используя Фурье-преобразование по времени и подставляя результаты в выражения для тензора напряжений, получены аналитические зависимости для динамических сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объёмной $\eta_v(\omega)$ вязкостей, а также модулей сдвиговой $\mu(\omega)$ и объёмной $K(\omega)$ упругостей, которые имеют вид

а) при по диффузионном законе затухания потоков:

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

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

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

$$K(\omega) = K_s + \frac{2\pi n^2 \sigma^3 \omega}{3} \int_0^\infty dr r^3 \frac{\partial \Phi(|\vec{r}|)}{\partial r} \int_{-\infty}^{+\infty} G_2(r, r_1, \omega) \varphi_0(|\vec{r}_1|) d\vec{r}_1, \quad (4)$$

где

$$K_r(\omega) = \frac{2\pi n^2 \sigma^3 \omega}{3} \int_0^\infty dr r^3 \frac{\partial \Phi(|\vec{r}|)}{\partial r} \int_{-\infty}^{+\infty} G_2(r, r_1, \omega) \varphi_0(|\vec{r}_1|) d\vec{r}_1, \quad (5)$$

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

жидкости

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

$$G_2(r, r_1, \omega) = -\frac{\tau_0(2\pi\tau_0)^{-\frac{1}{2}}}{4\pi r r_1} \left(e^{-\varphi_1(\sin\varphi_1 + \cos\varphi_1)} - e^{-\varphi_2(\sin\varphi_2 + \cos\varphi_2)} \right), \quad \varphi_0(|\vec{r}_1|) = \frac{r_1}{3} \frac{\partial g(r_1)}{\partial r_1} - \left[n \left(\frac{\partial g(r_1)}{\partial n} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g(r_1)}{\partial T} \right)_n \right], \quad \varphi_1 = \frac{\alpha}{2}(r - r_1),$$

$\varphi_2 = \frac{\alpha}{2}(r + r_1)$, $\alpha = (2\omega\tau_0)^{\frac{1}{2}}$, $\tau = \frac{m}{2\beta}$, $\tau_0 = \frac{\beta\sigma^2}{2kT}$, $\omega = 2\pi\nu$ - циклическая частота, $\omega^* = \omega\tau$ - приведенная частота, $\Phi^*(r) = \frac{\Phi(r)}{kT}$ - приведенный потенциал межмолекулярного взаимодействия.

б) при экспоненциальном законе затухания потоков:

$$\eta_s(\omega) = \frac{nkT\tau}{1+(\omega\tau)^2} + \frac{2\pi n^2 kT\sigma^3 \tau_0}{15} \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \frac{\partial g(|\vec{r}|)}{\partial r} r^4 dr, \quad (6)$$

$$\eta_V(\omega) = \frac{2\pi n^2 kT\sigma^3 \tau_0}{3} \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \varphi_0(r) r^3 dr, \quad (7)$$

$$\mu(\omega) = \frac{nkT\omega^2}{1+(\omega\tau)^2} + \frac{2\pi n^2 kT\sigma^3 \tau_0}{15} \frac{\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2}{1+\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2} \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \frac{\partial g(|\vec{r}|)}{\partial r} r^4 dr \quad (8)$$

$$K(\omega) = K_s - \frac{2\pi}{3} n^2 kT\sigma^3 \tau_0 \frac{\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2}{1+\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2} \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \varphi_0(r) r^3 dr, \quad (9)$$

где

$$K_r(\omega) = \frac{2\pi}{3} n^2 kT\sigma^3 \tau_0 \frac{\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2}{1+\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2} \int_0^\infty \frac{\partial \Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \varphi_0(r) r^3 dr. \quad (10)$$

В выражениях (1)-(10) при определенном выборе модели жидкости считаем $\Phi(|\vec{r}|)$ и $g(|\vec{r}|)$ известными [1,2]. Поэтому при проведения численных расчетов $\eta_s(\omega)$, $\eta_V(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ на основе выражений (1)-(10) необходим выбор потенциала межмолекулярного взаимодействия $\Phi(r)$ и радиальной функции распределения $g(r)$.

В третьей главе проведены численные расчеты $\eta_s(\omega)$, $\eta_V(\omega)$, $\mu(\omega)$ и $K(\omega)$ на основе определенного вида потенциала межмолекулярного взаимодействия $\Phi(r)$ и радиальной функции распределения. Согласно [1,2], для

полярных жидкостей потенциал межмолекулярного взаимодействия $\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b)$ выбираем в виде потенциала Штокмайера:

$$\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - \frac{d_a d_b}{r^3} V(\theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b), \quad (11)$$

где

$$V(\theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b) = 2\cos\theta_a \cos\theta_b - \sin\theta_a \sin\theta_b \cos(\xi_a - \xi_b) \quad (12)$$

Потенциал (11) представляет собой сочетание потенциала Леннарда-Джонса (12-6) и потенциала Кeesома, т.е. второй член в правой части выражения (11).

При анализе вязкоупругих свойств многоатомных жидкостей рассмотрены неполярные жидкости, состоящие из квазисферических молекул, обладающих симметрией, близкой к шаровой. Важной характеристикой таких молекул является ацентричность, которая описывает отсутствие у молекулы центра симметрии. Например, молекулы с симметрией, такие как метан (CH_4) или диоксид углерода (CO_2), обладают симметрией. Согласно [3], для этих жидкостей дипольный момент молекул равен нулю ($d_a = 0$ и $d_b = 0$). Поэтому при исследовании вязкоупругих свойств таких жидкостей в потенциале межмолекулярного взаимодействия (11) ограничимся потенциалом Леннарда-Джонса:

$$\Phi_{ab}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (13)$$

Радиальную функцию распределения $g(|\vec{r}_1|)$, согласно [4], примем в виде

$$g(|\vec{r}|) = y(\rho^*) \exp\left(-\frac{\Phi(|\vec{r}|)}{kT}\right), \quad (14)$$

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

В качестве контактного значения $y(\rho^*)$ на расстоянии $0 < r < \sigma$ ($r \approx 1$) примем выражение

$$y(\rho^*) = \frac{(2-\rho^*)}{2(1-\rho^*)^3}, \quad (15)$$

которое в работе [5] было получено Карнаханом и Старлингом где $\rho^* = \frac{\pi}{6} N_0 \sigma^3 \frac{\rho}{M}$ – приведенная плотность жидкости.

В интервале $\sigma < r < 2\sigma$ для $y(\rho^*)$ используем аналитическое выражение

$$y_1(\rho^*, r) = \frac{(1-\rho^*)^{-2}}{r} \sum_{l=0}^2 C_l e^{s_l(r-1)}, \quad (16)$$

которое было получено в работе [6] как решение уравнения Перкуса-Йевики для твердых сфер, где

$$C_l = \frac{1}{3} \sum_{m=0}^2 H_m J^m, \quad H_0 = 1 + \frac{1}{2} \rho^*,$$

$$H_1 = \frac{\sqrt{f^2 + \frac{1}{8}}}{4\rho^*} \left[x_2^2 (1 - 3\rho^* - 4\rho^{*2}) + x_1^2 \left(1 - \left(\frac{5}{2} \right) \rho^{*2} \right) \right], \quad (17)$$

$$H_2 = \frac{\sqrt{f^2 + \frac{1}{8}}}{4\rho^*} \left[x_1^2 (1 - 3\rho^* - 4\rho^{*2}) + x_2^2 \left(1 - \left(\frac{5}{2} \right) \rho^{*2} \right) \right], \quad (18)$$

$$S_1 = \frac{2\rho^*}{1-\rho^*} [(-1 + x_1 J^l + x_2 J^{-l})], j = \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\right),$$

$$x_{1,2} = \sqrt[3]{f \pm \sqrt{f^2 + \frac{1}{8}}}, f = \frac{(3+3\rho^*-\rho^{*2})}{4\rho^*} \quad (19)$$

Раскрывая в (16) суммы и используя выражения (17) - (19), для $y_1(\rho^*, r)$ в интервале $1 < r < 2$ получим

$$y_1(\rho^*, r) = \frac{C_0 e^{t_0(r-1)} + \frac{2}{3} C_1 e^{\gamma(1+\alpha_1)(r-1)}}{r(1-\rho^*)^2}. \quad (20)$$

где

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

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

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

В интервале $2 < r < 5$ (т.е. $2\sigma < r_{12} < 5\sigma$), согласно [7], решение уравнения Перкуса-Йевики имеет вид

$$y_2(\rho^*) = \frac{(\rho^*-4)(\rho^{*2}+2)^2}{24(2\rho^*+1)^2}. \quad (21)$$

Следуя [7], данное решение вклада $y_2(\rho^*)$ мало, поэтому в интервале $2 < r < 5$ его пренебрегаем, т.е. $y_2(\rho^*) \approx 1$. Поэтому выражение (14) с учетом (15), (20) и (21) при заданном $\Phi_{ab}(r)$ молекул жидкости (13) определяет аналитический вид $g(|\vec{r}|)$ в области $0 < r < 5$, как функция температуры, плотности многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами. Поэтому при численных расчетах радиальную функцию распределения принимаем в следующих видах:

$$g(\rho^*, r) = y(\rho^*) \exp\left(-\frac{\Phi(r)}{kT}\right), \quad (22)$$

$$g_1(\rho^*, r) = y_1(\rho^*, r) \exp\left(-\frac{\Phi(r)}{kT}\right), \quad (23)$$

$$g_2(r) = \exp\left(-\frac{\Phi(r)}{kT}\right), \quad (24)$$

В работе [8] с использованием метода автокорреляционной функции импульсов и оценки средней силы, действующей на частицу, получено выражение для коэффициента трения β следующего вида:

$$\beta^2 = \rho\sigma \int_0^\infty \nabla^2 \Phi(r) g(r) d\vec{r}, \quad (25)$$

где ρ - плотность жидкости, $\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$ - радиальная часть оператора Лапласа. С учетом выражений (22)-(24) выражение (25) принимает вид

$$\beta^2 = \rho\sigma \left(\int_0^1 \nabla^2 \Phi(r) g(\rho^*, r) d\vec{r} + \int_1^2 \nabla^2 \Phi(r) g_1(\rho^*, r) d\vec{r} + \int_2^5 \nabla^2 \Phi(r) g_2(r) d\vec{r} \right). \quad (26)$$

Подставляя выражения (14) и (22)-(26) в (1)-(10), проведём численный расчет коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей, модулей объемной $K(\omega)$, релаксационной $K_r(\omega)$ и сдвиговой $\mu(\omega)$ упругостей в широком диапазоне термодинамических параметров состояния для многоатомных жидкостей.

В качестве жидкостей с квазисферическими молекулами рассмотрены жидкий метан (CH_4), тетрафторметан (CF_4) и диоксид углерода (CO_2). Молекулярные параметры, входящие в потенциал Леннард-Джонса (ε/k , σ) взяты из работ [1,9], а соответствующие экспериментальные значения плотности и температуры из [10].

С целью количественного сравнения численных расчётов с экспериментом в табл. 1 представлены значения $\eta_s(\omega)$, рассчитанные по формулам (1) и (6) при приведённой частоте 10^{-5} для жидких CH_4 и CF_4 в зависимости от температуры и плотности. Из таблицы следует, что расчётные данные согласуются с экспериментальными данными. Согласно данным табл.1, численные значения отношения $\eta_v(\omega)/\eta_s(\omega)$ соответствуют примерно интервалу 1-10 при фиксированной частоте. В соответствии с релаксационной теорией [11], в данном интервале проявляется вклад структурной релаксации в вязкоупругие свойства жидкостей.

Таблица 1

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

Метан (CH_4)					Тетрафторметане (CF_4)				
T, K [11]	ρ , кг/м ³ [10]	η_s , мПа · с			T, K [11]	ρ , кг/м ³ [10]	η_s , мПа · с		
		[10]	форм. (6)	форм. (1)			[10]	форм. (6)	форм. (1)
100,0	440,0	0,1590	0,2047	0,1747	90,0	1906,5	3,5000	3,0406	2,4706
120,0	413,0	0,0980	0,1180	0,1027	110,0	1814,0	1,4700	1,6853	1,4033
140,0	380,0	0,0660	0,0726	0,0655	130,0	1713,0	0,7420	1,0551	0,8794
150,0	361,0	0,0520	0,0575	0,0529	150,0	1604,0	0,4570	0,7032	0,5801
160,0	339,0	0,0370	0,0452	0,0423	170,0	1478,0	0,3100	0,4741	0,3865
170,0	312,0	0,0320	0,0346	0,0329	190,0	1339,0	0,2310	0,3527	0,2799
180,0	277,0	0,0250	0,0251	0,0240	200,0	1225,0	0,2000	0,2367	0,1925

На рис. 1 и 2 приведены частотные зависимости $\eta_s(\omega)$ и $\mu(\omega)$ для жидкого метана при $T=100$ К и $T=150$ К. Видно, что область частотной дисперсии $\eta_s(\omega)$ и $\mu(\omega)$, вычисленная согласно формул (1) и (3), составляет 5 декад, что совпадает с экспериментальными данными [11,12]. Результаты, частотной дисперсии, полученной согласно формуле (6) для $\eta_s(\omega)$ и (8) для $\mu(\omega)$, дают примерно 2 декады, что является результатом экспоненциального закона затухания потоков, что соответствует результатам релаксационной теории и экспериментальным данным [11,12].

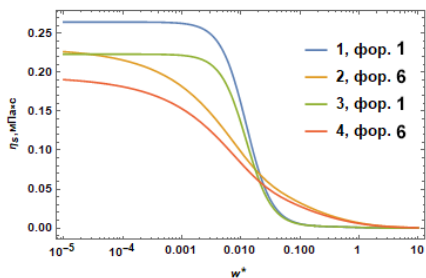


Рис. 1. Изотермическая частотная зависимость $\eta_s(\omega)$ жидкого CH_4 : 1 и 2 при $T=100$ К; 3 и 4 при $T=150$ К.

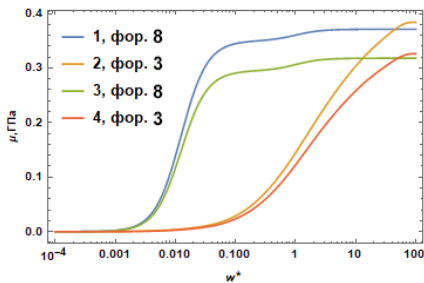


Рис. 2. Изотермическая частотная зависимость $\mu(\omega)$ жидкого CH_4 : 1 и 2 при $T=100$ К; 3 и 4 при $T=150$ К.

Полярные жидкости - это жидкости, содержащие полярные молекулы. Примерами таких жидкостей являются вода, этанол, метанол, аммиак и др. Учитывая формулы (11), (22)-(25) в выражениях (1)-(10), можно провести численные расчеты коэффициентов сдвиговой $\eta_s(\omega)$ и объемной $\eta_v(\omega)$ вязкостей, модулей объёмной $K(\omega)$, релаксационной $K_r(\omega)$, адиабатической K_s и сдвиговой $\mu(\omega)$ упругостей в широком диапазоне термодинамических параметров состояния и частот для полярных жидкостей на примере метилового спирта и воды. В табл. 2 и рис. 3-7 представлены результаты этих расчетов. Отметим, что молекулярные параметры, входящие в потенциал Штокмайера $(d_a, d_b, \frac{\epsilon}{k}, \sigma)$, взяты из [3,9]. Из табл. 2 следует, что полученные теоретические результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными.

Таблица 2

Изочастотные зависимости коэффициентов сдвиговой и объемной вязкостей от температуры и плотности для воды ($\omega^* = 10^{-5}$, $\theta_1 = \pi/6$, $\theta_2 = \pi/3$, $\xi_1 - \xi_2 = 0$).

t, °C [13]	ρ , кг/м ³ [13]	η_s , мПа·с			η_v , мПа·с			η_v/η_s		
		[13]	форм. (6)	форм. (1)	[13]	форм. (7)	форм. (2)	[13]	форм.(7)/ форм.(6)	форм.(2)/ форм.(1)
7	999,99	1,4300	0,7499	1,4737	4,5000	2,0980	3,4105	3,1469	2,7978	2,3143
10	999,73	1,3100	0,7404	1,4605	4,0300	1,9984	3,3267	3,0763	2,6992	2,2779
15	999,13	1,1400	0,7248	1,4384	3,3800	1,8428	3,1922	2,9649	2,5425	2,2193
25	997,07	0,8880	0,6939	1,3926	2,4700	1,5666	2,9390	2,7815	2,2577	2,1105
40	992,20	0,6530	0,6488	1,3217	1,8400	1,2281	2,5972	2,8178	1,8929	1,9651
50	988,00	0,5470	0,6199	1,2740	1,4800	1,0444	2,3932	2,7057	1,6849	1,8785

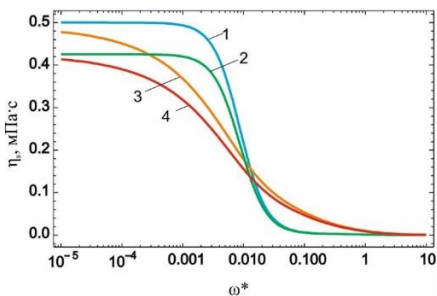


Рис. 3. Частотная зависимость коэффициента сдвиговой $\eta_s(\omega)$ вязкости метанола при температурах $t=10^\circ\text{C}$ (линии 1,3), $t=40^\circ\text{C}$ (линии 2,4) и соответствующих им плотностях при фиксированных $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$; линии 1,2 по формуле (6) и линии 3,4 по формуле (1).

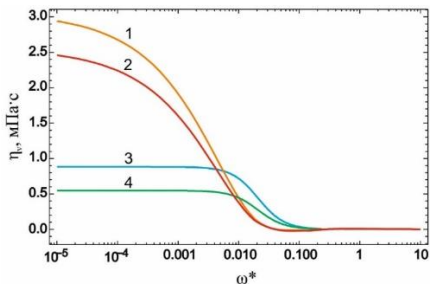


Рис. 4. Частотная зависимость коэффициента объемной $\eta_v(\omega)$ вязкости метанола при температурах $t=10^\circ\text{C}$ (линии 1,3), $t=40^\circ\text{C}$ (линии 2,4) и соответствующих им плотностях при фиксированных $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$; линии 1,2 по формуле (2) и линии 3,4 по формуле (7).

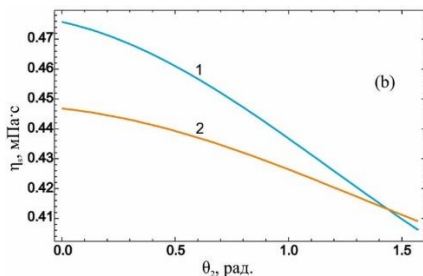
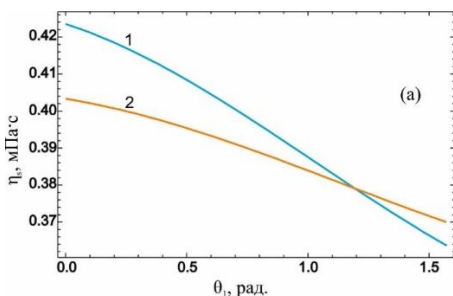


Рис. 5. Зависимость коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_s(\omega)$ метанола от углов θ_1 и θ_2 при фиксированном $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и температуре $t=20^\circ\text{C}$, линии 1 по формуле (6) и линии 2 по формуле (1).

Из рис. 3-5 видно, что $\eta_s(\omega)$ по разному зависит от закона затухания релаксирующих потоков, что обусловлено учётом вкладов релаксационных процессов.

Согласно рис. 6 и 7, области частотной дисперсии модулей сдвиговой $\mu(\omega)$ и объёмной $K(\omega)$ упругостей метанола при температурах $t=30^\circ\text{C}$ и $t=50^\circ\text{C}$ при фиксированных $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ на основе формул (3) и (4) являются широкими (кривые 3 и 4), т.е. ~ 105 Гц, а на основе формул (9) и (10)

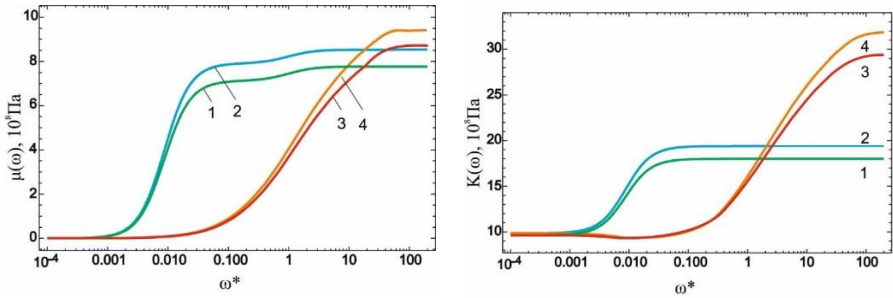


Рис. 6. Зависимость сдвигового $\mu(\omega)$ и объемного $K(\omega)$ модулей упругости метанола от частоты при температурах $t=30^\circ\text{C}$ (линии 2,4), $t=50^\circ\text{C}$ (линии 1,3) и соответствующих им плотностях при фиксированных $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$. Линии 1,2 по формулам (3) и (4), линии 3,4 по формулам (9) и (10).

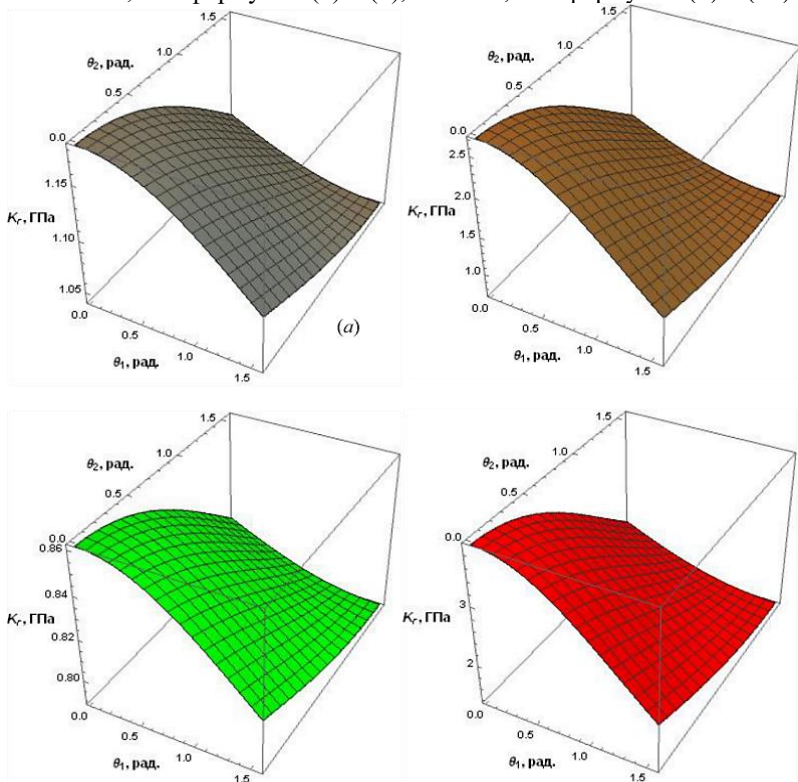


Рис. 7. Зависимость релаксационного модуля упругости $K_r(\omega)$ от углов θ_1 и θ_2 при фиксированной $\xi_1-\xi_2=0^\circ$; (a)- для метилового спирта при температуре $t=20^\circ\text{C}$ по формуле (4); (b)- для метилового спирта при температуре $t=20^\circ\text{C}$ по формуле (10); (c)- для воды при температуре $t=15^\circ\text{C}$ по формуле (4); (d)- для воды при температуре $t=15^\circ\text{C}$ по формуле (10).

являются узкими (кривые 1 и 2), т.е. $\sim 10^2$ Гц, что соответствует общей релаксационной теорий [10,11]. Следовательно, область частотной дисперсии вязкоупругих свойств полярных жидкостей тесно связана с природой восстановления равновесной структуры и сложным взаимодействием между молекулами, а также влиянием различных факторов, таких как размерные эффекты, ориентация молекул.

Четвертая глава посвящена исследованию акустических свойств многоатомных и полярных жидкостей для случая, когда релаксирующие потоки затухают по степенному или экспоненциальному законам. Методом кинетических уравнений для скорости $C(\omega)$ и коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ звуковых волн получены следующие аналитические выражения:

$$C(\omega) = C_S \left\{ 1 + \frac{1}{2\rho C_0^2} \left[\frac{4}{3} \mu(\omega) + K_r(\omega) \right] \right\}, \quad (27)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega^2}{2\rho C_S^3} \left[\frac{4}{3} \eta_s(\omega) + \eta_v(\omega) \right], \quad (28)$$

где $C_S = \sqrt{\frac{K_S}{\rho}}$ - адиабатическая скорость звука, ρ - плотность жидкость, $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$, а $\mu(\omega)$, $K_r(\omega)$, $\eta_s(\omega)$ и $\eta_v(\omega)$ определяются по формулам (1)-(10).

Результаты численных расчетов коэффициента поглощения приведены в табл. 3 и 4 и на рис. 8-10 и сравнены с экспериментальными результатами.

Таблица 3

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

t, °C [13]	ρ , кг/м ³ [13]	C_S , м/с [13]	$\alpha/\omega^2 \cdot 10^{14}$, м ⁻¹ ·с ² (форм. (28))		
			[13]	с учетом форм. (6) и (7)	с учетом форм. (1) и (2)
7	999,99	1434,92	4,280	1,154	1,336
10	999,73	1447,29	3,760	1,092	1,277
15	999,13	1465,96	3,070	1,000	1,189
25	997,07	1496,73	2,160	0,853	1,048
40	992,20	1528,89	1,510	0,697	0,894
50	988,00	1542,57	1,210	0,620	0,818

В табл. 3 приведены теоретические значения коэффициента поглощения α/ω^2 в зависимости от температуры и плотности, вычисленные по формуле (28) с учетом формул (1)-(2) и (3)-(4) при частоте $\omega^* = 10^{-5}$ и фиксированных значениях углов $\theta_1 = \pi/6$, $\theta_2 = \pi/6$, $\xi_1 - \xi_2 = 0$ для воды. Из таблицы следует, что полученные

теоретические результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными.

На рис. 8 *a, b* показаны зависимости изочастотного коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 для метилового спирта и воды от углов θ_1 и θ_2 при фиксированной $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и постоянной температуре. На рис. 8 *c, d* приведена частотная дисперсия звуковых волн $C(\omega)$ для метилового спирта и воды от углов θ_1 при фиксированных $\theta_2=\pi/6$ и $\xi_1-\xi_2=0^\circ$ и постоянной температуре. Из

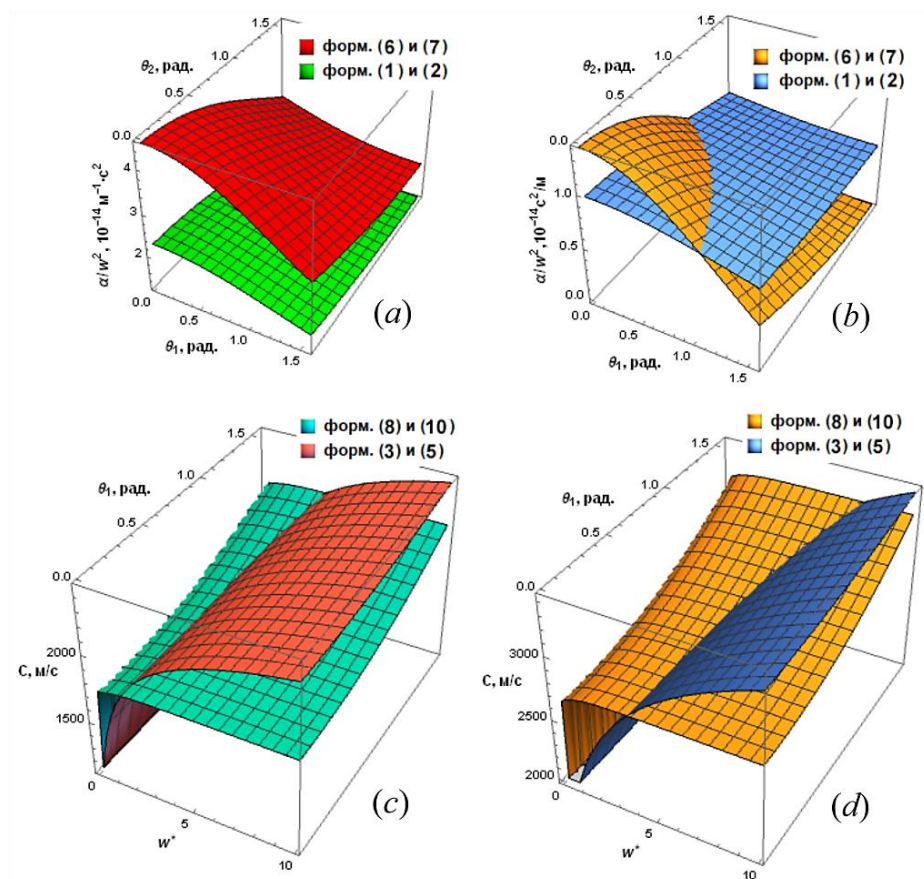


Рис. 8. Зависимость коэффициента поглощения α/ω^2 и скорости $C(\omega)$ звуковых волн от углов θ_1 и θ_2 при фиксированной $\xi_1-\xi_2=0^\circ$: (a) и (b)- для метилового спирта при температуре $t=20^\circ\text{C}$; (c) и (d)- для воды при температуре $t=40^\circ\text{C}$.

рисунков видно, что коэффициент поглощения и скорость распространения звука зависят от закона затухания релаксирующих потоков по-разному.

В табл. 4 и 5 приведены результаты численных расчетов $\alpha(\omega)$ в зависимости от температуры и плотности, выполненные по формуле (28) при частоте $\omega^* = 10^{-5}$ для жидкого метана и тетрафторметана.

Таблица 4

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

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

Таблица 5

Зависимость коэффициента поглощения звука от температуры
и плотности для жидкого тетрафторметана (CF₄) ($\omega^* = 10^{-5}$).

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

Из табл. 4 и 5 следует, что полученные теоретические результаты находятся в качественном согласии с экспериментальными данными.

На рис. 9 *a, b* показан результат численного расчета частотной зависимости коэффициента поглощения звуковых волн α/ω^2 для метана и диоксида углерода при двух температурах, а на рис. 9 *c, d* приведены частотная и температурная зависимости скорости звука $C(\omega)$ для жидкого метана и жидкого диоксида углерода согласно формулам (27) и (28) с учетом диффузионного и экспоненциального законов затухания потоков.

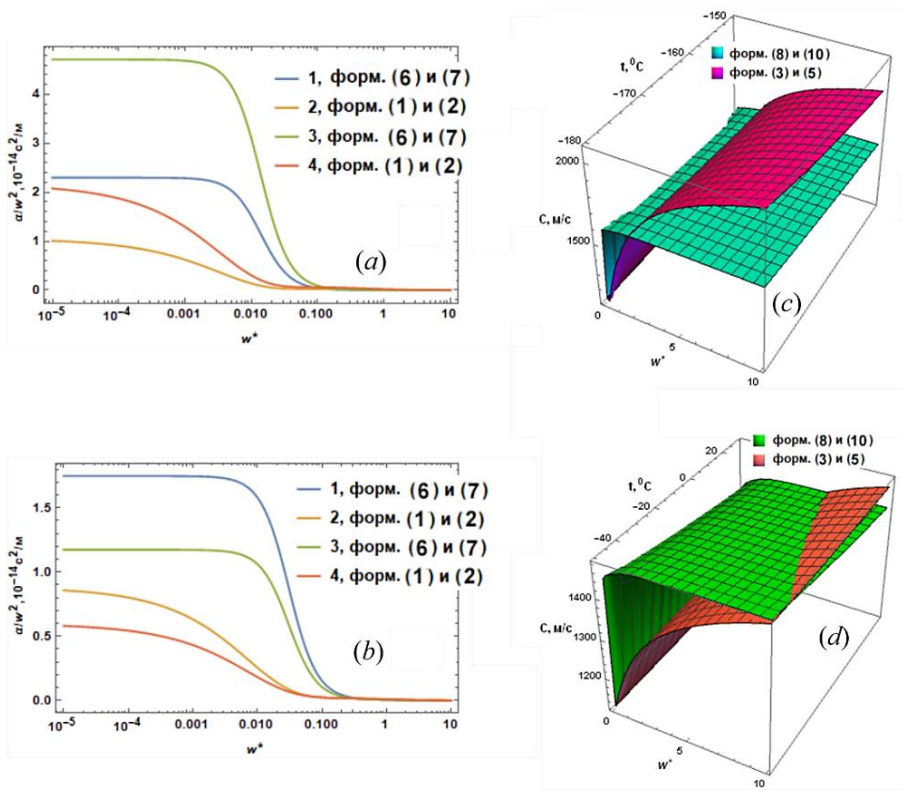


Рис. 9. Частотные и температурные зависимости коэффициента поглощения и скорости звуковых волн для жидкого метана и диоксида углерода: (а) -для CH_4 , линии 1 и 2 при $T=150 \text{ K}$ и линии 3 и 4 при $T=120 \text{ K}$; (б) -для CO_2 , линии 1 и 2 при $T=110 \text{ K}$ и линии 3 и 4 при $T=170 \text{ K}$; (с)- для CH_4 ; (д) -для CO_2 .

Согласно рис. 9, область частотной дисперсии α/ω^2 и $C(\omega)$ на основе формул (1)-(2) является широкой 10^5 Гц , а на основе (8)-(10) - узкой и составляет примерно 10^2 Гц , что соответствует общей релаксационной теории жидкостей.

Полученные данные показывают, что акустические свойства полярных и многоатомных жидкостей по-разному реагируют на затухание релаксирующих потоков. Это связано с различиями в природе релаксационных механизмов, которые формируют данные свойства. Установлено, что формирование данных свойств обусловлено не только межмолекулярными взаимодействиями, но и динамикой восстановления равновесной структуры, а также влиянием ориентационной структуры молекул и влиянием масштабных эффектов.

ОБЩИЕ ВЫВОДЫ

1. Для жидкостей с сферическими молекулами выведено уравнение бинарной плотности частиц в конфигурационном пространстве и получено его общее решение.

2. С учётом степенного и экспоненциального законов затухания потоков в импульсном и конфигурационном пространствах получены аналитические выражения для коэффициентов сдвиговой и объёмной вязкостей, а также модулей сдвиговой и объёмной упругостей жидкостей.

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

5. Проведен численный расчет для коэффициентов объёмной и сдвиговой вязкостей и модулей сдвиговой и объёмной упругостей для многоатомных и полярных жидкостей в широком интервале изменения плотности, температуры и частоты. Показано, что область частотной дисперсии исследуемых многоатомных и полярных жидкостей на основе диффузионного механизма является широкой ($\sim 10^5$ Гц), а в случае экспоненциального закона затухания потоков является узкой ($\sim 10^2$ Гц), что соответствует результатам феноменологической релаксационной теории.

6. Проведен численный расчет скорости распространения и коэффициента поглощения акустических волн для многоатомных и полярных жидкостей от температуры, плотности и угловой ориентации молекул для полярных жидкостей. Определены области частотной дисперсии акустических свойств многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами и полярных жидкостей с учётом влияния природы затухания релаксирующих потоков. Полученные результаты сравнены с экспериментальными данными.

Рекомендации по практическому использованию результатов

В работе предложена теория жидкого состояния на основе молекулярно-кинетического подхода к динамическим явлениям, раскрывающая природу внутренних релаксационных механизмов в жидкостях, а также их влияние на динамические вязкоупругие и акустические свойства многоатомных и полярных жидкостей. В процессе исследования приняты во внимание угловые ориентации сложных молекул, а также влияние внутренних релаксационных процессов,

происходящих в жидкостях в широком диапазоне изменений термодинамических параметров и частоты внешних воздействий. Результаты численных расчётов расширяют существующую базу данных о вязкоупругих и акустических свойствах рассмотренных типов жидкостей, что позволяет учесть их поведение в различных эксплуатационных условиях, а также установить зависимость вязкоупругих и акустических свойств этих жидкостей от их молекулярного строения, что позволит оптимизировать условия работы различных технологических процессов и устройств.

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

СТАТЬИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

[1-А] Баладжонзода, С.Д. Частотная дисперсия вязкоупругих свойств полярных жидкостей в случае экспоненциального закона затухания релаксирующих потоков / С.Одинаев, Д.М Акдонов., С.Д.Баладжонзода // Известия НАН Таджикистана. Отдел. физ.-мат., хим., геол. и тех. наук, 2024.- №1(194).-С. 41-49.

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

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

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

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

Статьи, опубликованные в других научных журналах,

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

Публикации в материалах научных конференций

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

[8-А] Балажонзода, С.Д. Хосиятҳои часпакии моеъҳои кутбӣ аз параметрҳои термодинамикии ҳолат /С.Д. Балажонзода // Материалы Республиканской научно-практической конференции «Взаимосвязь науки с производством в процессе ускоренной индустриализации республики Таджикистан», Част 1., Душанбе, 2022, (22-23 апреля 2022г.) С.129-131.

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

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

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

[12-А] Баладжонзода, С.Д. Расчет скорости распространения звука в полярных жидкостях / Д.М.Акдонов, С.Д.Баладжонзода // Республиканскую научно-практическую конференцию «Проблемы и тенденции развития точных, математических и естественных наук», посвященной двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 гг.). 28 мая 2024 года. с. 296-299.

[13-А] Баладжонзода С.Д. Исследование частотной дисперсии коэффициента поглощения звука полярных жидкостей / Д.М.Акдонов, С.Д.Баладжонзода // Республиканская научно-практическая конференция «Актуальные проблемы физики конденсированного состояния», посвященная 35-летию государственной независимости Республики Таджикистан и «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических

наук в сфере науки и образования», 80-летию профессора Шерматова М., 85-летию профессора Джамолова М. Худжанд. 20-21 мая 2024. с. 27-30.

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

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

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

Список цитированных источников

1. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей // М.: ИЛ, 1961.-930 с.
2. Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы // М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012.-394 с.
3. Осипов О.А., Минкин В.И., Гарновский А.Д. Справочник по дипольным моментам // М: «Высшая школа», 1971.-416 с.
4. Юхновский И.Р., Головкин М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем // Киев: Наукова думка, 1980.-372 с.
5. Odinaev S., Akdodov D., Mirzaminov Kh. Study of frequency dispersion of shear and bulk viscosity coefficients for liquid argon, krypton and xenon under different parameters of state // Journal of Molecular Liquids, 2011.-V.164.-No.1-2.-P. 22–28.
6. Wertheim M.S. Exact solution of the Percus-Yevick integral equation for hard spheres. – Phys. Rev. Lett., 1963, 10, № 8, p. 321-323.
7. Smith W.R., Henderson D.J. Analytical representation of the Percus-Yevick hard sphere radial distribution function. – Molecular Physics, 1970, 19, № 3, p. 441-446.
8. Одинаев С., Адхамов А.А. Молекулярная теория структурной релаксации и явлений переноса в жидкостях // Душанбе: Дониш, 1998.-230 с.
9. Рид Р., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей // Л: «Химия», 1971.-709 с.
10. Михайленко С. А., Дударь Б. Г. Акустическая релаксация в жидком метане и тетрафторметане // Физика низких температур, 1976.-Т.2.-№1.-С.93–104.

11. Литовиц Т. Структурная и сдвиговая релаксация в жидкостях. [Физическая акустика, 11, часть А. под ред. У. Мэзона] / Т. Литовиц, К. Дэвис // М.: «Мир», 1968.–С.298-370.
12. Михайлов И.Г., Соловьев В.А., Сырников Ю.П. Основы молекулярной акустики // М.: Наука, 1964.-514 с.
13. Holmes M.J., Parker N.G., Povey M. J. Temperature dependence of bulk viscosity in water using acoustic spectroscopy // Journal of physics. Conference series, 2011-01, Vol.269 (1), p.012011-7.

ДОНИШГОҲИ МИЛЛИ ТОҶИКИСТОН

Бо ҳуқуқи дастнавис

ВБД: 5.32.7 + 532.783



Балаҷонзода Сулаймонҷони Додарҷон
Омӯзиши хосиятҳои ҳаспакию ҷандирӣ ва акустикии моеъҳои
квасисферавӣ ва қутбӣ

Автореферати
диссертатсия барои дарёфти дараҷаи илмии доктори фалсафа
(PhD) - доктор аз рӯйи ихтисоси 6D060400 - Физика
(6D060402 - Физикаи назариявӣ)

Душанбе - 2025

Диссертатсия дар кафедраи физикаи назариявии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон иҷро шудааст.

Рохбари илмӣ: **Ақдодов Донаёр Мавлобахшович** - доктори илмҳои физикаю математика, дотсент, мудири кафедраи физикаи умумии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон.

Муқарризони расмӣ: **Қобилов Маруф Маҳмудович** - мудири шуъбаи математикаи амалӣ ва механикаи Институти математикаи ба номи А.Ҷураевии АМИТ.

Абдурахмонов Абдурахмон Абдулкадимович - номзоди илмҳои физикаю математика, муаллими калони кафедраи физикаи назариявии Донишгоҳи давлатии омӯзгории Тоҷикистон ба номи С.Айнӣ

Муассисаи пешбар: Донишгоҳи техникии Тоҷикистон ба номи академик. М.С.Осимӣ

Ҳимояи диссертатсия санаи «20» январӣ соли 2026, соати 14:00 дар ҷаласаи Шурои диссертатсионии 6D.KOA-056 назди Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, суроғай 734025, Ҷумҳурии Тоҷикистон, шаҳри Душанбе, маҳаллаи Буни Ҳисорак, бинои таълимии №16, факултети физика, Толори Шурои диссертатсионӣ 206, баргузор мегардад.

Бо диссертатсия дар сомонаи www.tnu.tj ва Китобхонаи илмӣ марказии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, суроғай 734025, хиёбони Рудакӣ, 17 шинос шудан мумкин аст.

Автореферат «___» _____ соли 2025 фиристода шудааст.

Котиби илмӣ шӯрои диссертатсионии
6D.KOA-056 , н.и.ф.м , дотсент



Исломов З.З.

ХУСУСИЯТИ УМУМИИ КОР

Мубрамии мавзуи таҳқиқот. Дар шароити рушди технологияҳои нав, ки хосиятҳои моеъҳо аҳамияти махсус доранд, омӯзиши амиқи рафтори онҳо таҳти таъсири омилҳои беруна, ба монанди температура, фишор ва майдонҳои берунаи дорои басомадҳои гуногун, зарур мебошад. Дар замони рушди бесобиқаи нанотехнология ва усулҳои инноватсионии истеҳсолот, дониши дақиқ оид ба хосиятҳои моеъҳо барои баланд бардоштани равандҳо ва ёфтани рохҳои нави инноватсионӣ ниҳоят зарур мегардад. Аз ҷумла, моеъҳое, ки аз молекулаҳои бисёратома иборатанд (аз ду ё бештар атом), дорои сохтори мураккаб мебошанд, ки маҳз ҳамин сохтор хосиятҳои махсуси онҳоро муайян мекунад, аз қабилӣ кутбиши баланд, часпакӣ ва қобилият ба ташкили бандҳои гидрогенӣ.

Тавре маълум аст, моеъҳои кутбӣ - ин моеъҳое мебошанд, ки аз молекулаҳои кутбнок иборатанд ва онҳо аз сабаби тақсимои нобаробари электронҳо дар байни атомҳо дар бандҳои ковалентӣ, моменти диполии ғайрисифрӣ доранд. Кутбиши моеъҳо тавассути сохтори фазои молекулаҳои онҳо муайян карда мешавад. Дар равандҳои техникӣ ва табиӣ, моеъҳо зери таъсири омилҳои гуногун беруна қарор мегиранд, ки ин ҳолат аксаран боиси вайроншавии устувори динамикии онҳо мегардад. Таҳқиқотҳо нишон медиҳанд, ки дар ҳолати таъсирҳои баландсуръат, моеъҳо нисбат ба шароити устувор ё таъсирҳои сусти рафтори дигар нишон медиҳанд. Масалан, хосиятҳои часпакию чандири ва акустикии онҳо аз шароити равандҳои сусти мувозинатӣ фарқ мекунанд. Рафтори ҷунин хосиятҳо ҳам аз хусусияти таъсири берунаи таъйирёбанда ва ҳам аз хусусиятҳои ҷараёни раванди релаксатсионӣ дар ҳуди моеъ вобаста аст. Аз ҳамин сабаб, барои тавсифи назариявии дурусти хосиятҳои динамикии моеъҳои кутбӣ ва бисёратома, ки сохтори молекулавӣ ва раванди релаксатсионии сохтории онҳоро ба назар мегирад, истифодаи усулҳои мушаххаси назарияи статистикийи ҳолати моеъ зарур мебошад. Ҷунин таҳқиқотҳои илмӣ имкон медиҳад, ки механизмҳои муайянкунандаи рафтори динамикии моеъҳо амиқтар фаҳмида шаванд. Аз ин рӯ, яке аз вазифаҳои асосии назарияи ҳолати моеъ истифодаи усули молекулавӣ-кинетикӣ нисбат ба падидаҳои динамикӣ, ошкор сохтани моҳияти равандҳои дохилии релаксатсионӣ ва муайян кардани қонуниятҳои таъсири онҳо ба хосиятҳои динамикии часпакию чандирии ва акустикийи моеъҳои бисёратома ва кутбӣ вобаста ба параметрҳои термодинамикии ҳолат ва басомади таъсири беруна мебошад. Ин вазифа самти асосии таҳқиқоти мазкурро ташкил дода, заминае барои таҳияҳои минбаъдаи илмӣ дар ин соҳа мебошад.

Мақсади таҳқиқот аз инкишоф ва татбиқи усули муодилаҳои кинетикӣ барои омӯзиши хосиятҳои динамикии часпакӣ ва акустикийи моеъҳои кутбӣ ва бисёратомаи молекулаҳои тақрибан сферӣ иборат мебошад. Дар рафти таҳқиқот ба ориентатсияҳои кунҷии молекулаҳои мураккаб ва инҷунин таъсири равандҳои дохилии релаксатсионӣ, ки дар моеъҳо дар соҳаи васеи тағйироти параметрҳои термодинамикӣ ва басомади таъсири беруна рух медиҳанд, диққат дода шуд. Ин амал имкон фароҳам меоварад, ки рафтори моеъ

ва робитаи он дар сатҳи молекулавӣ бо баҳодиҳии бештар, на танҳо бо назардошти хусусиятҳои сохторӣ, балки бо динамикаи ҳолатҳои дохилиашон, арзёбӣ карда шавад.

Барои расидан ба ҳадаф, **вазифаҳои асосии таҳқиқот** чунин муайян шуданд:

- ҳосил кардани ифодаҳои аналитикӣ барои модулҳои динамикии чандирӣ ва коэффитсиентҳои часпакии моеъҳо бо дарназардошти равандҳои релаксатсионӣ дар мавриди ба намуди диффузионӣ ё экспоненсиалӣ хомушшавии селҳои гуногун.

- интиҳоби потенциали ҳамтаъсироти байнизарраҳо, функсияи тақсимои радиалӣ, ва коэффитсиенти соиш барои моеъҳои бисёратомаи молекулаҳояшон тақрибан сохтори сферӣ дошта ва моеъҳои қутбӣ;

- гузаронидани ҳисобҳои ададӣ барои коэффитсиентҳои часпакии лағжишӣ ва ҳаҷмӣ ва модулҳои ба онҳо мувофиқи чандирии лағжишӣ ва ҳаҷмии моеъҳои бисёратомай молекулаҳояшон квазисферӣ ва моеъҳои қутбӣ дар соҳаи васеи тағйироти параметрҳои термодинамикӣ ва басомади таъсири беруна;

- таҳқиқи дисперсияи басомадии параметрҳои акустикии моеъҳои бисёратома ва қутбӣ бо дарназардошти табиати хомушшавии селҳои релаксатсионӣ ва баҳодиҳии таъсири механизми релаксатсия ба рафтори акустикии онҳо;

- гузаронидани ҳисобҳои ададӣ барои суръати паҳншавӣ ва коэффитсиенти фурубурди мавҷҳои акустикӣ дар доираи васеи тағйироти зичӣ, температура ва басомад барои моеъҳои бисёратомай молекулаҳояшон квазисферӣ ва моеъҳои қутбӣ.

Объекти таҳқиқот хосиятҳои динамикии часпакиючандирӣ ва акустикии моеъҳои бисёратомай молекулаҳояшон квазисферӣ ва моеъҳои қутбӣ мебошанд. Рафтори онҳо таҳти таъсироти гуногуни беруна таҳлил карда мешавад, таваҷҷӯҳ махсус ба сохтори молекулавӣ ва байнимолекулавӣ дода мешавад.

Мавзӯи таҳқиқот вобастагии назариявии хосиятҳои часпакиючандирӣ ва акустикии моеъҳои квазисферӣ ва қутбӣ аз сохтори молекулавӣ, шароити беруна ва хусусиятҳои дохилии система иборат мебошад.

Аппарати назариявии таҳқиқот усулҳои муодилаи кинетикӣ, ҳисобҳои ададиро бо истифода аз барномаҳои муосири компютерӣ ва дигар равандҳоро дар бар мегирад, ки онҳо имкон медиҳанд хосиятҳои динамикӣ ва акустикии моеъҳоро моделсозӣ ва таҳлил кунанд. Усулҳои зикршуда имконият медиҳанд, ки ҳар гуна параметрҳои додашударо дуруст ҳисоб карда, вобастагиҳои онҳоро аз омилҳои гуногуни берунӣ ва дохилӣ бо тафсил таҳқиқ карда шавад.

Навоварии илмӣ таҳқиқот дар он аст, ки аввалин бор:

-ҳисобҳои адабии коэффитсиенти соиш (β), вақтҳои релаксация (τ ва τ_0) вобаста ба зичӣ, температура ва ориентатсия барои моеъҳои квазисферӣ ва қутбӣ бори аввал анҷом дода шуданд, бо дарназардошти интиҳоби потенциали ҳамтаъсироти байнимолекулавӣ (потенциалҳои Ленард-Чонс ва Штокмайер) ва хусусиятҳои моделии функсияи тақсироти радиалии молекулаҳо;

нишон дода шуд, ки соҳаи дисперсияи басомадии коэффитсиентҳои часпакии лағжишӣ $\eta_s(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $\eta_v(\omega)$, инчунин модулҳои чандирии лағжишӣ $\mu(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $K(\omega)$ аз хусусияти хомушшавии сели релаксатсионӣ вобаста аст: дар ҳолати хомушшавии диффузионӣ соҳаи дисперсия васеъ ($\sim 10^5$ Ҳс) мушоҳида мешавад, дар ҳоле ки хомушшавии экспоненсиалии ин соҳа ба таври назаррас камтар мешавад ($\sim 10^2$ Ҳс), ки он фарқиятро дар сохтори равандҳои релаксатсионӣ инъикос мекунад.

– **муайян гардид**, ки ҳангоми таҳқиқи вобастагҳои басомадӣ дар соҳаи басомадҳои паст ($\omega\tau \ll 1$), ки барои хомушшавии диффузионӣ хос аст, модули ҳаҷмии чандирӣ $K(\omega)$ ба ҳудуди адиабатии худ K_s майл мекунад, дар ҳоле ки модули чандирии лағжишӣ $\mu(\omega)$ тибқи қонун $\sim \omega^{\frac{3}{2}}$ коҳиш меёбад; коэффитсиентҳои часпакӣ $\eta_s(\omega)$ ва $\eta_v(\omega)$ дар ин маврид ба қиматҳои статикӣ худ η_s ва η_v мувофиқи қонун $\sim \omega^{\frac{1}{2}}$ наздик мешаванд; дар соҳаи басомади баланд ($\omega\tau \gg 1$) баръакс, коҳиши коэффитсиентҳои часпакӣ $\eta_s(\omega)$ ва $\eta_v(\omega)$ мутаносибан бо $\sim \omega^{-1}$ мушоҳида мешавад, дар ин ҳол қиматҳои модулҳои чандирӣ $\mu(\omega)$ ва $K(\omega)$ аз басомад вобаста намешаванд ва ба ҳудудҳои басомади баланд мувофиқ мешаванд, ки дар назарияи Свансиг муайян шудаанд.

– **нишон дода шуд**, ки дар ҳолати басомадҳои паст ($\omega\tau \ll 1$) ҳангоми ҷой доштани механизми экспоненсиалии релаксатсия, модулҳои чандирӣ $\mu(\omega)$ ва $K(\omega)$ ба қиматҳои асимптотӣ худ майл мекунад, дар ҳоле ки коэффитсиентҳои часпакии лағжишӣ $\eta_s(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $\eta_v(\omega)$ хусусияти статикӣ худро нигоҳ медоранд (яъне η_s ва η_v). Дар соҳаи басомадҳои баланд ($\omega\tau \gg 1$) модулҳои $\mu(\omega)$ ва $K(\omega)$ доимӣ монда, коэффитсиентҳои часпакӣ $\eta_s(\omega)$ ва $\eta_v(\omega)$ мувофиқи қонун $\sim \omega^{-2}$ коҳиш меёбанд, ки бо муқаррароти назарияи умумии релаксатсионӣ мувофиқат мекунад.

– **исбот шуд**, ки дар ҳамаи моеъҳои мавриди таҳқиқёфта, яъне бо молекулаҳои квазисферӣ ва қутбӣ, равандҳои релаксатсионӣ аз ҳамтаъсиротҳои транслясионии молекулаҳо ва таҷдиди сохтории онҳо вобаста мебошанд, ки ин омил хусусияти ҳисёти моеъҳоро ба таъсири беруна муайян мекунад.

– **муайян шуд**, ки соҳаи дисперсияи басомадии суръати паҳншавӣ ва коэффитсиенти фурӯбурди мавҷҳои акустикӣ дар моеъҳо бо молекулаҳои квазисферӣ ва моеъҳои қутбӣ аз хусусияти хомушшавии сели релаксатсионӣ вобаста аст: дар ҳолати қонуни диффузионӣ соҳаи дисперсия васеъ ($\sim 10^5$ Ҳс) мушоҳида мешавад ва дар ҳоле ки дар ҳолати хомушшавии экспоненсиалии селҳо ин соҳа ба таври назаррас хурдтар мешавад ($\sim 10^2$ Ҳс), ки ба маълумотҳои

акустикӣ ва инчунин натиҷаҳои назарияи умумии релаксатсионӣ мутобиқат мекунад.

Нуқтаҳои ба химоя пешниҳодшаванда:

– дисперсияи басомадии коэффитсиентҳои часпакии лағжишӣ $\eta_s(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $\eta_v(\omega)$, модулҳои чандирии лағжишӣ $\mu(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $K(\omega)$ дар мавриди бо қонунҳои диффузионӣ ва экспоненсиалӣ ҳомушшавии селҳои релаксатсионӣ.

– қоидаҳои рафтори модулҳои чандирии ҳаҷмӣ $K(\omega)$ ва лағжишӣ $\mu(\omega)$, инчунин коэффитсиентҳои часпакии лағжишӣ $\eta_s(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $\eta_v(\omega)$ дар соҳаҳои басомади паст ва баланд.

– рафтори асимптотикии модулҳои чандирии ҳаҷмӣ $K(\omega)$ ва лағжишӣ $\mu(\omega)$ ва хусусияти статикӣ коэффитсиентҳои часпакии лағжишӣ $\eta_s(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $\eta_v(\omega)$ дар соҳаҳои басомади паст ва баланд.

– алоқамандии равандҳои релаксатсионӣ дар моеъҳои дорои молекулаҳои квазисферӣ ва моеъҳои қутбӣ бо ҳаракатҳои транслясионии молекулаҳо ва таҷдиди сохтори онҳо ҳангоми ҳамтаъсирот бо майдонҳои беруна.

Аҳамияти назариявӣ ва амалии таҳқиқот дар он аст, ки омӯзиши хосиятҳои часпакиючандирӣ ва акустикии моеъҳо молекулаҳояшон квазисферӣ ва қутбӣ ба дарки амиқи сохтори мураккаби молекулавӣ дар шароити ошубҳои беруна мусоидат мекунад. Таҳияи моделҳои назариявӣ, ки таъсири сохтори молекулавӣ ва омилҳои берунӣ (ба монанди орендатсияи кунҷии молекулаҳо, температура ва зичӣ) ба хосиятҳои акустикии моеъҳоро тавсиф мекунад, ба тақмили назарияҳои мавҷуда оид ба рафтори часпакиючандирӣ ва паҳншавии мавҷҳои акустикӣ дар моеъҳои қутбӣ ва квазисферӣ равона гардидааст, ки ин як назарияи нави хусусиятҳои физикии чунин системаҳо мебошад.

Аҳамияти амалӣ тадқиқот имкон медиҳад, ки қиматҳои рақамии хосиятҳои часпакиючандирӣ ва акустикии моеъҳои бисёратома ва қутбӣ дар ҳолатҳои гуногуни таъсироти динамикӣ муайян ва баҳогузори карда шаванд. Натиҷаҳои ҳисобҳои рақамӣ базаи мавҷудаи додаҳо оид ба хосиятҳои часпакиючандирӣ ва акустикии моеъҳои баррасишударо васеъ намуда, имконият фароҳам меоранд, ки рафтори ин моеъҳоро дар шароити гуногуни қутбӣ ба ҳисоб гирифта, инчунин вобастагии хосиятҳои часпакиючандирӣ ва акустикии онҳо ба сохтори молекулавии ин моеъҳо муайян карда шавад. Инчунин, таҳқиқот имкон медиҳад, ки шартҳои қорӣ таҳҷизоти технологӣ ва дастгоҳҳои гуногун танзим карда шаванд. Маводҳои диссертатсия барои донишҷӯёни ихтисосҳои физика, химия ва дигар соҳаҳо дар иҷрои қорҳои дипломӣ ва магистрӣ, инчунин барои унвонҷӯён, докторантони PhD ва аспирантон муфид мебошанд.

Мутобиқати рисола ба шиносномаи ихтисоси илмӣ: мавзӯ, усулҳои таҳқиқот ва пешниҳодҳои илмӣ мувофиқати пурра бо шиносномаи ихтисоси илмӣ 6D060402 — физикаи назариявӣ (физика ва математика) дорад, махсусан қисми 1 «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»; қисми 5 «Инкишофи назария ва таҳқиқи хосиятҳои умумӣ ва қонуниятҳои динамикаи ғайрихаттии системаҳои ғайримувозинатӣ» ва қисми 6 «Амсиласозии ҳодисаҳои физикӣ».

Дарачаи эътиמודнокии натиҷаҳои таҳқиқот бо саҳеҳии баланди ифодаҳои аналитикии истифодашудаи муодилаҳои кинетикӣ барои функсияҳои тақсимои якзаррагӣ ва дузаррагӣ, муодилаи зичии бинарии навъи Смолуховский, истифодаи потенциалҳои ҳамтаъсироти байнимолекулавӣ ва ҳисобҳои рақамӣ, ки мувофиқати хуб бо натиҷаҳои таҷрибавӣ ва маълумотҳои назарияи умумии релаксатсионӣ доранд, тасдиқ мегардад.

Саҳми шахсии довталаб дар интихоб намудани усулҳо ва таҳияи алгоритмҳои ҳалли масъалаҳои гузошташуда, муайян кардани қонуниятҳои асосии равандҳои динамикӣ дар моеъҳо, гузаронидани ҳисобҳои рақамӣ бо истифода аз барномаҳои муосири компютерӣ, коркард, таҳлил ва тафсири натиҷаҳо ҳалқунанда мебошад.

Тасвиб ва амалсозии натиҷаҳои диссертатсия. Натиҷаҳои асосии таҳқиқот муаррифӣ шудаанд дар:

6th International Scientific and Practical Conference «Science, Education, Innovation: Topical Issues and Modern Aspects», 2022. (April 16-18, 2022). Tallinn, Estonia; конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ-амалӣ «Ҳамбастагии илм бо истеҳсолот дар раванди саноаткунории босуръати Ҷумҳурии Тоҷикистон», Душанбе, 2022, (22-23 апрели 2022г.); конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ-амалӣ «Моделсозии математикӣ ва компютерии равандҳои физикӣ» бахшида ба «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф», Душанбе, 2023, (9 феввали 2023г.); конференсияи байналмилалӣ илмӣ-амалӣ «Комёбиҳои нав дар соҳаи илмҳои табиатшиносӣ ва технологияҳои иттилоотӣ», бахшида ба «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар солҳои 2020-2040 гг.», Душанбе, 2023, (30 майи 2023г.); конференсияи байналмилалӣ илмӣ-амалӣ дар мавзӯи «Масоили муосири физика ва химияи полимерҳо» бахшида ба «75-солагии таъсисёбии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон» ва «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф (солҳои 2020-2040)», (Душанбе, 10 октябри 2023); конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ-амалӣ «Мушкilot ва тамоюлҳои рушди илмҳои дақиқ, математика ва табиатшиносӣ», бахшида ба «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф (2020-2040 гг.)», (Душанбе, 28 майи 2024 года); конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ-амалӣ таҳти унвони «Муаммоҳои мубрами физикаи ҳолатҳои конденсӣ» бахшида ба 35-солагии истиқлоли давлатии Ҷумҳурии Тоҷикистон ва «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф» ва 80-солагии профессор Шерматов М., 85-солагии профессор Ҷамолов М. (Хучанд, 20-21 майи 2024); конференсияи илмӣ байналмилалӣ «Илмҳои физикӣ ва техникӣ дар фазои ИДМ: масъалаҳо ва дурнамои рушд», (Душанбе, 29–30 ноябри 2024); Конференсияи байналмилалӣ илмӣ-амалӣ таҳти унвони «Муаммоҳо ва

дурнамои рушди илми физика», (Худжанд, 11-12 март 2025); конференсияи байналмиллалии илмӣ-амалӣ дар мавзуи «Масоили муосири физикаи нимноқилҳо ва диэлектрикҳо» бахшида ба «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ барои солҳои 2020-2040» дар соҳаи илм ва маориф ва «35 - солагии кафедраи электроникаи физикӣ» (Душанбе, 30 апрели 2025).

Интишорот аз рӯйи мавзӯи диссертатсия: дар асоси натиҷаҳои тадқиқот 16 кор нашр шудааст, ки аз онҳо 5 мақола дар маҷаллаҳои тақризшавандаи КОА назди Президенти Ҷумҳурии Тоҷикистон, 1-мақола дар нашриҳои дигар ва 10 маводи конференсияҳои ҷумҳуриявӣ ва байналмилалӣ.

Соҳтор ва ҳаҷми диссертатсия: диссертатсия аз муқаддима, чор боб ва рӯйхати адабиёт иборат аст. Ҳаҷми диссертатсия 140 саҳифаи матнӣ chopро ташкил дода, он аз 9 – ҷадвал, 31-расм ва 173- номгӯи рӯйхати адабиётҳо иборат мебошад.

Калимаҳои калидӣ: моеъҳои бисёратома ва қутбӣ, функсияи тақсимот, потенциали ҳамтаъсирот, сел, релаксатсия, акустика.

МУҲТАВОИ АСОСИИ КОР

Дар муқаддима аҳамияти мавзӯи таҳқиқот асоснок шуда, мақсад ва вазифаҳои кор муайян шудааст, сатҳи омӯзиши масъала баҳогузорӣ гардидааст, объекти ва предмети таҳқиқот интихоб намудааст, навоариҳои илмӣ, нуқтаҳои ба ҳимоя пешниҳодшаванда, аҳамияти назариявӣ ва амалӣ таҳқиқот нишон дода шудаанд.

Дар боби аввал натиҷаҳои маълуми таҳқиқоти таҷрибавӣ, назариявӣ ва моделсозии компютерии ҳосиятҳои ҳаспакиночандирӣ ва акустикӣ моеъҳо пешниҳод гардидааст. Нишон дода шудааст, ки усулҳои назариявӣ ва методҳои моделсозии компютерӣ мавҷуда сатҳи кофӣ тавсифи ҳосиятҳои динамикии моеъҳоро бо дарназардошти равандҳои релаксатсионӣ надоранд.

Дар боби дуюм ба таҳқиқи ҳосиятҳои ҳаспакиночандирӣ моеъҳо, ки селҳои релаксатсионӣ бо қонунҳои дараҷагӣ ё экспоненсиалӣ ҳомӯш мешаванд, бахшида шудааст. Тавсифи муодилаҳои кинетикии ибтидоӣ барои функсияҳои тақсими яқзаррагӣ ва дузаррагӣ оварда шудааст ва бо таъя ба ин муодилаҳо, бо дарназардошти флукуатсияҳои миқёси калон ва истифодаи пайдарпайи моменти импульсӣ барои функсияи тақсими дузаррагӣ, муодилаи навъи Смолуховский барои зичии бинарӣ ҳосил гардидааст. Ҳамзамон, бо дарназардошти зичии бинарии ғайримувозинатӣ муодилаҳои гидродинамикаи умумӣ ҳосил гардидааст. Баъдан аз табилооти вақтии Фурье дар формулаи тензори шиддат бо назардошти сели зичии бинари истифода намуда, ифодаҳои аналитикиро барои коэффитсиентҳои динамикии ҳаспакии лағжиш $\eta_s(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $\eta_v(\omega)$, инчунин модулҳои чандирии лағжиш $\mu(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $K(\omega)$ ҳосил намудаанд, ки шакли зерин доранд:

а) ҳангоми бо қонуни диффузионӣ ҳомӯш шудани селҳо:

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

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

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

$$K(\omega) = K_s + \frac{2\pi n^2\sigma^3\omega}{3} \int_0^\infty dr r^3 \frac{\partial\Phi(|\vec{r}|)}{\partial r} \int_{-\infty}^{+\infty} G_2(r, r_1, \omega) \varphi_0(|\vec{r}_1|) d\vec{r}_1, \quad (4)$$

ки

$$K_r(\omega) = \frac{2\pi n^2\sigma^3\omega}{3} \int_0^\infty dr r^3 \frac{\partial\Phi(|\vec{r}|)}{\partial r} \int_{-\infty}^{+\infty} G_2(r, r_1, \omega) \varphi_0(|\vec{r}_1|) d\vec{r}_1, \quad (5)$$

$K_s = n \left(\frac{\partial P}{\partial n} \right)_T + \frac{T}{n c_V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_n^2$ - модули чандирии ҳаҷмии адиабатии моёъ буда,

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

$$G_2(r, r_1, \omega) = -\frac{\tau_0(2\pi\tau_0)^{-\frac{1}{2}}}{4\pi r r_1} (e^{-\varphi_1}(\sin\varphi_1 + \cos\varphi_1) - e^{-\varphi_2}(\sin\varphi_2 + \cos\varphi_2)), \quad \varphi_0(|\vec{r}_1|) = \frac{r_1}{3} \frac{\partial g(r_1)}{\partial r_1} - \left[n \left(\frac{\partial g(r_1)}{\partial n} \right)_T + \gamma T \left(\frac{\partial g(r_1)}{\partial T} \right)_n \right], \quad \varphi_1 = \frac{\alpha}{2}(r - r_1),$$

$$\varphi_2 = \frac{\alpha}{2}(r + r_1), \quad \alpha = (2\omega\tau_0)^{\frac{1}{2}}, \quad \tau = \frac{m}{2\beta}, \quad \tau_0 = \frac{\beta\sigma^2}{2kT}, \quad \omega = 2\pi\nu - \text{басомади}$$

даврий, $\omega^* = \omega\tau$ - басомади овардашуда, $\Phi^*(r) \frac{\Phi(r)}{kT}$ -потенсиали ҳамтаъсиrotи байнимолекулавӣ аст.

б) ҳангоми бо қонуни экспоненсиалӣ ҳомӯш шудани селҳо:

$$\eta_s(\omega) = \frac{nkT\tau}{1+(\omega\tau)^2} + \frac{2\pi n^2kT\sigma^3\tau_0}{15 \cdot 1+(\omega\tau_0)^2} \int_0^\infty \frac{\partial\Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \frac{\partial g(|\vec{r}|)}{\partial r} r^4 dr, \quad (6)$$

$$\eta_V(\omega) = \frac{2\pi n^2kT\sigma^3\tau_0}{3 \cdot 1+(\omega\tau_0)^2} \int_0^\infty \frac{\partial\Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \varphi_0(r) r^3 dr, \quad (7)$$

$$\mu(\omega) = \frac{nkT\omega^2}{1+(\omega\tau)^2} + \frac{2\pi n^2kT\sigma^3\tau_0}{15} \frac{\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2}{1+\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2} \int_0^\infty \frac{\partial\Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \frac{\partial g(|\vec{r}|)}{\partial r} r^4 dr \quad (8)$$

$$(\omega) = K_s - \frac{2\pi n^2kT\sigma^3\tau_0}{3} \frac{\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2}{1+\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2} \int_0^\infty \frac{\partial\Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \varphi_0(r) r^3 dr, \quad (9)$$

ки

$$K_r(\omega) = \frac{2\pi n^2kT\sigma^3\tau_0}{3} \frac{\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2}{1+\omega^2 \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^2} \int_0^\infty \frac{\partial\Phi^*(|\vec{r}|)}{\partial r} \varphi_0(r) r^3 dr. \quad (10)$$

Дар ифодаҳои (1)-(10) бо интиҳои модели муайяни моёъ, $\Phi(|\vec{r}|)$ ва $g(|\vec{r}|)$ маълум ҳисобида мешаванд [1,2]. Аз ин рӯ, ҳангоми гузаронидани ҳисобҳои ададӣ барои $\eta_s(\omega)$, $\eta_V(\omega)$, $\mu(\omega)$ ва $K(\omega)$ бо истифода аз ифодаҳои (1)-(10) интиҳои потенциали ҳамтаъсиrotи байнимолекулавӣ $\Phi(|\vec{r}|)$ ва функсияи тақсимои радиалӣ $g(|\vec{r}|)$ зарур аст.

Дар боби сеюм ҳисобҳои рақамии $\eta_s(\omega)$, $\eta_V(\omega)$, $\mu(\omega)$ ва $K(\omega)$ бо истифода аз намуди амиқи ҳамтаъсиrotи байнимолекулавӣ $\Phi(|\vec{r}|)$ ва функсияи

тақсимои радиалӣ $g(|\vec{r}|)$ иҷро гардидаст. Мувофиқи [1,2], барои моеъҳои қутбӣ функсияи ҳамтаъсири байнимолекулавӣ $\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b)$ ҳамчун потенциали Штокмайер интихоб карда мешавад:

$$\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - \frac{d_a d_b}{r^3} V(\theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b), \quad (11)$$

ки дар инҷо

$$V(\theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b) = 2\cos\theta_a \cos\theta_b - \sin\theta_a \sin\theta_b \cos(\xi_a - \xi_b) \quad (12)$$

Потенсиали (11) аз суммаи потенциали Леннард-Љонс (12–6) ва потенциали Кeesom, ки таъсири ҷозибай дипол-диполро ифода мекунад ва ҳамчун узви дуум дар қисми рости ифодаи (11) ворид гардидааст.

Дар мавриди таҳлили хосиятҳои часпакино-чандирий моеъҳои бисёратома, мо моеъҳои ғайрикутбиро мавриди омӯзиш қарор додем, ки аз молекулаҳои квазисферӣ иборатанд, яъне молекулаҳои, ки шакли онҳо наздик ба сферикӣ аст ва дорои симметрияи қариб курашакл мебошанд. Хусусияти муҳими чунин молекулаҳо параметри асентрий мебошад, ки маънои набудани маркази симметрия дар молекулаҳоро ифода менамояд. Масалан, молекулаҳои монанди метан (CH_4) ё диоксидаи карбон (CO_2), дорои симметрия мебошанд. Бар асоси қори [3], барои чунин моеъҳо моменти диполии молекулаҳо баробар ба сифр аст ($d_a = 0$ ва $d_b = 0$). Аз ин рӯ, ҳангоми таҳқиқи хосиятҳои часпакино-чандирии чунин моеъҳо, дар потенциали ҳамтаъсири байнимолекулавӣ (11) танҳо бо потенциали Леннард-Љонс маҳдуд мешавем:

$$\Phi_{ab}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (13)$$

Функсияи радиалӣ тақсимои $g(|\vec{r}_1|)$, тибқи [4], ба шакли зер қабул карда мешавад:

$$g(|\vec{r}|) = y(\rho^*) \exp\left(-\frac{\Phi(|\vec{r}|)}{kT}\right), \quad (14)$$

ки дар он $y(\rho^*)$ - функсияи тақсимои бинарии ду хат, $r = r_{12}/\sigma$ - масофаи бевоҳиди байни молекулаҳо, ва σ - диаметри молекула мебошад.

Ҳангоми интихоби $y(\rho^*)$ дар масофаи $0 < r < \sigma$ (дар наздикии $r \approx 1$) аз ифодаи пешниҳодкардаи Карнахан ва Старлинг [5] истифода мебарем:

$$y(\rho^*) = \frac{(2 - \rho^*)}{2(1 - \rho^*)^3}, \quad (15)$$

ки дар он $\rho^* = \frac{\pi}{6} N_0 \sigma^3 \frac{\rho}{M}$ - зичии овардашудаи моеъ мебошад.

Дар фосилаи $1 < r < 2$ (яъне $\sigma < r_{12} < 2\sigma$) барои $y(\rho^*)$ ифодаи аналитикиро истифода мебарем, ки Вертхейм [6] ҳамчун ҳалли муодилаи Перкус–Евик барои сфераҳои саҳт пешниҳод кардааст.

$$y_1(\rho^*, r) = \frac{(1 - \rho^*)^{-2}}{r} \sum_{l=0}^2 C_l e^{s_l(r-1)}, \quad (16)$$

ки дар инҷо $C_l = \frac{1}{3} \sum_{m=0}^2 H_m J^m$, $H_0 = 1 + \frac{1}{2} \rho^*$,

$$H_1 = \frac{\sqrt{f^2 + \frac{1}{8}}}{4\rho^*} \left[x_2^2 (1 - 3\rho^* - 4\rho^{*2}) + x_1^2 \left(1 - \left(\frac{5}{2} \right) \rho^{*2} \right) \right], \quad (17)$$

$$H_2 = \frac{\sqrt{f^2 + \frac{1}{8}}}{4\rho^*} \left[x_1^2 (1 - 3\rho^* - 4\rho^{*2}) + x_2^2 \left(1 - \left(\frac{5}{2} \right) \rho^{*2} \right) \right], \quad (18)$$

$$S_1 = \frac{2\rho^*}{1-\rho^*} [(-1 + x_1 J^l + x_2 J^{-l})], j = \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\right),$$

$$x_{1,2} = \sqrt[3]{f \pm \sqrt{f^2 + \frac{1}{8}}}, f = \frac{(3+3\rho^*-\rho^{*2})}{4\rho^*} \quad (19)$$

Баъди кушодани сумма дар ифодаи (16) ва бо истифода аз ифодаҳои (17)–(19), барои $y_1(\rho^*, r)$ дар фосилаи $1 < r < 2$ ҳосил мекунем:

$$y_1(\rho^*, r) = \frac{C_0 e^{t_0(r-1) + \frac{2}{3}C_1 e^{\gamma(1+\alpha_1)(r-1)}}}{r(1-\rho^*)^2}. \quad (20)$$

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

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

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

Дар фосилаи $2 < r < 5$ ($2\sigma < r_{12} < 5\sigma$), мувофиқи [7], ҳалли муодилаи Перкус–Евик шакли зеринро дорад:

$$y_2(\rho^*) = \frac{(\rho^*-4)(\rho^{*2}+2)^2}{24(2\rho^*+1)^2}. \quad (21)$$

Бо дарназардошти кори [7], таъсири ҳиссагии $y_2(\rho^*)$ дар ин интервал кам буда, бинобар ин дар фосилаи $2 < r < 5$ онро ба назар намегирем, яъне $y_2(\rho^*) \approx 1$ мешавад. Аз ин рӯ, ифодаи (14) бо дарназардошти ифодаҳои (15), (20) ва (21), барои потенциали ҳамтаъсиrotи байнимолекулавӣ (13), шакли аналитикии функцияи тақсмоти радиалии $g(r)$ дар фосилаи $0 < r < 5$ муайян мекунад, ки он ба температура ва зичии моеъҳои бисёратома бо молекулаҳои квазисферӣ вобаста мебошад. Ҳамин тариқ, ғангоми ҳисобҳои ададӣ функцияи тақсмоти радиалиро дар шаклҳои зерин қабул мекунем:

$$g(\rho^*, r) = y(\rho^*) \exp\left(-\frac{\Phi(r)}{kT}\right), \quad (22)$$

$$g_1(\rho^*, r) = y_1(\rho^*, r) \exp\left(-\frac{\Phi(r)}{kT}\right), \quad (23)$$

$$g_2(r) = \exp\left(-\frac{\Phi(r)}{kT}\right), \quad (24)$$

Дар кори [8] бо истифода аз усули функцияи автокоррелясионии импульсо ва муайян кардани қувваи миёнаи ҳамтаъсиrot ба зарра, ифодаи зерин барои коэффисиенти соиш β ба даст оварда шудааст:

$$\beta^2 = \rho\sigma \int_0^\infty \nabla^2 \Phi(r) g(r) d\vec{r}, \quad (25)$$

ки дар ин ҷо ρ - зичии моеъ ва $\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$ – қисми радиалии оператори Лаплас мебошанд. Бо дарназардошти ифодаҳои (22)–(24), ифодаи (25) шакли зерин мегирад:

$$\beta^2 = \rho\sigma \left(\int_0^1 \nabla^2 \Phi(r) g(\rho^*, r) d\vec{r} + \int_1^2 \nabla^2 \Phi(r) g_1(\rho^*, r) d\vec{r} + \int_2^5 \nabla^2 \Phi(r) g_2(r) d\vec{r} \right). \quad (26)$$

Ифодаҳои (14) ва (22)–(26) дар ифодаҳои (1)–(10) гузошта, ҳисобкунии ададии коэффисиентҳои часпакии лағжишӣ $\eta_s(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $\eta_v(\omega)$, модулҳои чандирии ҳаҷмӣ $K(\omega)$, релаксатсионӣ $K_r(\omega)$ ва лағжишӣ $\mu(\omega)$ -ро дар соҳаи

васеи параметрҳои термодинамики барои моеъҳои бисёратома анҷом медиҳем.

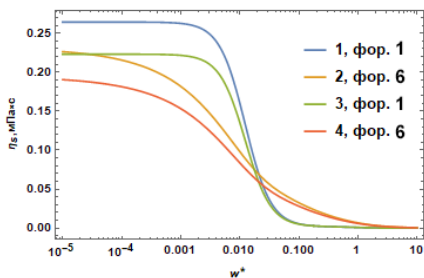
Ба сифати моеъҳои дорои молекулаҳои квазисферӣ баррасшаванда: метани моеъ (CH_4), тетрафторметан (CF_4) ва дуоксиди карбон (CO_2)-ро интихоб менамоем. Параметрҳои молекулавӣ, ки дар потенциали Леннард–Чонс аст (ε/k , σ) аз қорҳои [1,9] гирифта шуда, қиматҳои таҷрибавии зичӣ ва температура мутобиқи қори [10] истифода шудаанд.

Барои муқоисаи миқдори натиҷаҳои ҳисобҳои ададӣ бо маълумоти таҷрибавӣ, дар ҷадвали 1 қиматҳои назариявии $\eta_s(\omega)$ вобаста ба температура ва зичӣ оварда шудаанд, ки бо истифода аз формулаҳои (1) ва (6) дар басомади нисбатан пасти барои CH_4 ва CF_4 ҳисоб шудаанд. Аз ҷадвал айён аст, ки натиҷаҳои бадастомада бо маълумоти таҷрибавӣ дар мувофиқати сифатӣ қарор доранд. Тибқи маълумоти ҷадвали 1, қиматҳои $\eta_v(\omega)/\eta_s(\omega)$ тақрибан дар фосилаи 1 то 10 барои басомади доимӣ қарор доранд. Мувофиқи назарияи релаксатсионӣ [11], дар ин фосила саҳми релаксатси сохторӣ дар ҳосиятҳои часпакию-чандирӣ моеъҳо ҷой дорад.

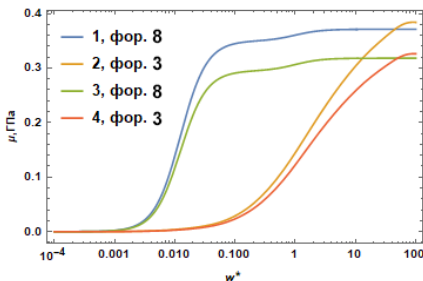
Ҷадвали 1. Вобастагии изобасомади $\eta_s(\omega)$ аз температура ва зичӣ барои моеъҳои CH_4 ва CF_4 ($\omega\tau = \omega^* = 10^{-5}$).

Метан (CH_4)					Тетрафторметане (CF_4)				
Т, К [11]	ρ , кг/м ³ [10]	η_s , мПа · с			Т, К [11]	ρ , кг/м ³ [10]	η_s , мПа · с		
		[10]	форм. (6)	форм. (1)			[10]	форм. (6)	форм. (1)
100,0	440,0	0,1590	0,2047	0,1747	90,0	1906,5	3,5000	3,0406	2,4706
120,0	413,0	0,0980	0,1180	0,1027	110,0	1814,0	1,4700	1,6853	1,4033
140,0	380,0	0,0660	0,0726	0,0655	130,0	1713,0	0,7420	1,0551	0,8794
150,0	361,0	0,0520	0,0575	0,0529	150,0	1604,0	0,4570	0,7032	0,5801
160,0	339,0	0,0370	0,0452	0,0423	170,0	1478,0	0,3100	0,4741	0,3865
170,0	312,0	0,0320	0,0346	0,0329	190,0	1339,0	0,2310	0,3527	0,2799
180,0	277,0	0,0250	0,0251	0,0240	200,0	1225,0	0,2000	0,2367	0,1925

Дар расмҳои 1 ва 2 вобастагии басомадии коэффицентҳои $\eta_s(\omega)$ ва $\mu(\omega)$, барои метани моеъ дар температураҳои $T=100$ К ва $T=150$ К нишон дода шудаанд. Аз расмҳо дида мешавад, ки соҳаи дисперсияи басомадии $\eta_s(\omega)$ ва $\mu(\omega)$, ки бо истифода аз формулаҳои (1) ва (3) ҳисоб карда шудааст, тақрибан 5 декадаро ташкил медиҳад, ки бо маълумоти таҷрибавии қорҳои [11,12] мувофиқат мекунад. Соҳаҳои дисперсияи басомадӣ, ки тибқи формулаи (6) барои $\eta_s(\omega)$ ва (8) барои $\mu(\omega)$ бадаст омадаанд, тақрибан 2 декадаро ташкил медиҳанд. Ин натиҷа ба қонуни экспоненсиалӣ ҳомушшавии селҳо асоси ёфтааст, ки ба назарияи релаксатсионӣ ва маълумоти таҷрибавии [11,12] мутобиқ мекунад.



Расм 1. Вобастагии басомадии изотермии $\eta_s(\omega)$ барои метани моеъ (CH_4): хатҳои 1 ва 2 дар температураи $T=100$ K; хатҳои 3 ва 4 дар температураи $T=150$ K.

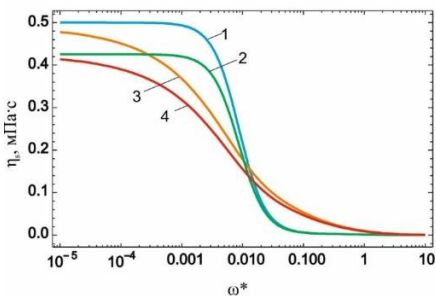


Расм 2. Вобастагии басомадии изотермии $\mu(\omega)$ барои метани моеъ: хатҳои 1 ва 2 дар температураи $T=100$ K; хатҳои 3 ва 4 дар температураи $T=150$ K.

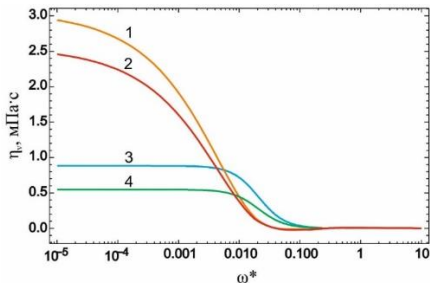
Моеъҳои қутбӣ - ин моеъҳоест, ки аз молекулаҳои қутбнок иборатанд. Мисоли чунин моеъҳо об, этанол, метанол, аммиак ва ғайра мебошанд. Бо дарназардошти формулаҳои (11) ва (22)–(25) дар ифодаҳои (1)–(10), метавон ҳисобҳои адабии коэффицентҳои часпакии лағжишӣ $\eta_s(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $\eta_v(\omega)$, модулҳои чандирии ҳаҷмӣ $K(\omega)$, релаксатсионӣ $K_r(\omega)$, адиабатӣ K_s ва лағжишӣ $\mu(\omega)$ -ро барои моеъҳои қутбӣ дар соҳаи васеи параметрҳои термодинамикии ҳолат ва басомадҳо барои моеъҳои қутбӣ, дар мисоли спирти метилӣ ва об анҷом диҳем. Дар қадвали 2 ва расмҳои 3–7 натиҷаҳои ин ҳисобҳо пешниҳод шудаанд. Қайд мекунем, ки параметрҳои молекулавии потенциали Штокмайер ($d_a, d_b, \frac{\epsilon}{k}, \sigma$) аз қорҳои [3,9] гирифта шудаанд. Аз қадвали 2 бармеояд, ки натиҷаҳои назариявии бадастомада бо маълумоти таҷрибавӣ мувофиқати сифатӣ доранд.

Қадвали 2. Вобастагии изобасомадии коэффицентҳои часпакии лағжишӣ ва ҳаҷмии аз температура ва зичӣ барои об ($\omega^* = 10^{-5}$, $\theta_1 = \pi/6$, $\theta_2 = \pi/3$, $\xi_1 - \xi_2 = 0$).

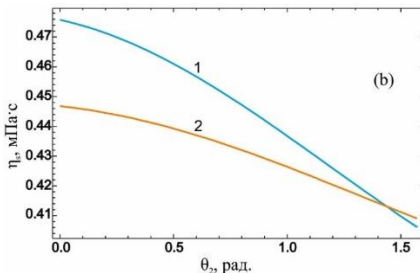
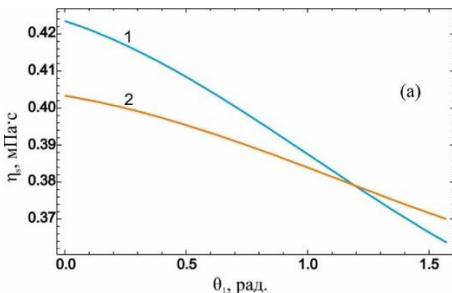
t, °C [13]	ρ , кг/м ³ [13]	η_s , мПа · с			η_v , мПа · с			η_v/η_s		
		[13]	форм. (6)	форм. (1)	[13]	форм. (7)	форм. (2)	[13]	форм.(7)/ форм.(6)	форм.(2)/ форм.(1)
7	999,99	1,4300	0,7499	1,4737	4,5000	2,0980	3,4105	3,1469	2,7978	2,3143
10	999,73	1,3100	0,7404	1,4605	4,0300	1,9984	3,3267	3,0763	2,6992	2,2779
15	999,13	1,1400	0,7248	1,4384	3,3800	1,8428	3,1922	2,9649	2,5425	2,2193
25	997,07	0,8880	0,6939	1,3926	2,4700	1,5666	2,9390	2,7815	2,2577	2,1105
40	992,20	0,6530	0,6488	1,3217	1,8400	1,2281	2,5972	2,8178	1,8929	1,9651
50	988,00	0,5470	0,6199	1,2740	1,4800	1,0444	2,3932	2,7057	1,6849	1,8785



Расм 3. Вобастагии басомадии коэффиенти часпакии лағжиш $\eta_s(\omega)$ барои метанол дар температураҳои $t = 10^\circ\text{C}$ (хатҳои 1,3), $t = 40^\circ\text{C}$ (хатҳои 2,4) ва зичиҳои мутобиқи онҳо ҳангоми доимӣ будани $\theta_1 = 30^\circ$, $\theta_2 = 45^\circ$, $\xi_1 - \xi_2 = 0^\circ$; хатҳои 1 ва 2 бо формулаи (6) ва хатҳои 3 ва 4 бо формулаи (1) ҳисоб шудаанд.



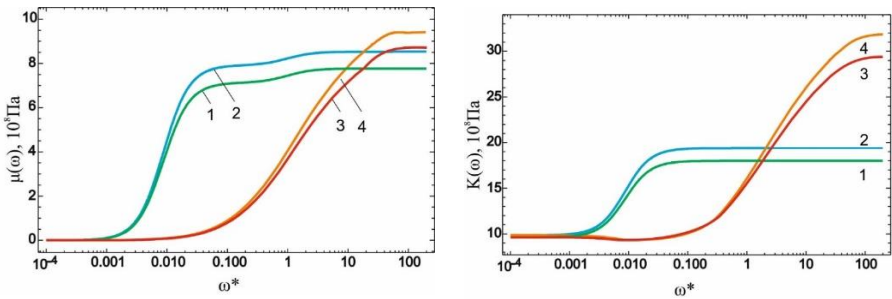
Расм 3. Вобастагии басомадии коэффиенти часпакии ҳаҷмӣ $\eta_v(\omega)$ барои метанол дар температураҳои $t=10^\circ\text{C}$ (хатҳои 1,3), $t=40^\circ\text{C}$ (хатҳои 2,4) ва зичиҳои мутобиқи онҳо ҳангоми доимӣ будани $\theta_1 = 30^\circ$, $\theta_2 = 45^\circ$, $\xi_1 - \xi_2 = 0^\circ$; хатҳои 1 ва 2 бо формулаи (7) ва хатҳои 3 ва 4 бо формулаи (2) ҳисоб шудаанд.



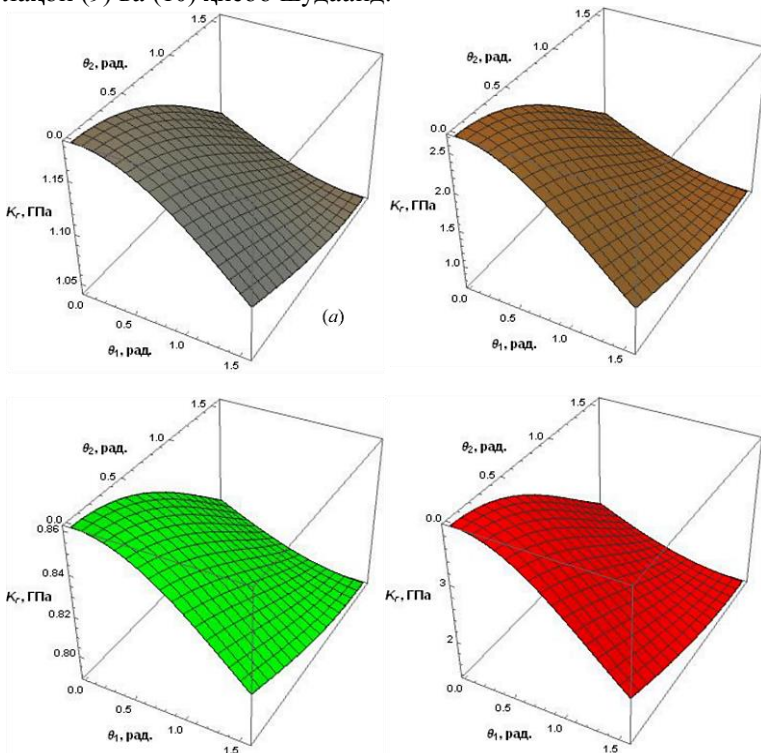
Расм 5. Вобастагии коэффиенти часпакии лағжишии $\eta_s(\omega)$ барои метанол аз кунҷҳои θ_1 ва θ_2 дар мавриди доимӣ будани $\xi_1 - \xi_2 = 0^\circ$ ва температураи $t = 20^\circ\text{C}$; хатти 1 бо формулаи (6) ва хатти 2 бо формулаи (1) ҳисоб шудааст.

Аз расмҳои 3-5 дида мешавад, ки $\eta_s(\omega)$ вобаста ба қонуни хомушшавии селҳои релаксатсионӣ аз ҳамдигар фарқ мекунад, ки ин бо сабаби ба ҳисоб гирифтани саҳми равандҳои релаксатсионӣ мебошад.

Мувофиқи расмҳои 6 ва 7, соҳаҳои дисперсияи басомадии модулҳои чандирии лағжишӣ $\mu(\omega)$ ва ҳаҷмии $K(\omega)$ метанол дар температураҳои $t=30^\circ\text{C}$ ва $t=50^\circ\text{C}$ дар мавриди доимӣ будани $\theta_1 = 30^\circ$, $\theta_2 = 45^\circ$, $\xi_1 - \xi_2 = 0^\circ$, ки бо формулаҳои (3) ва (4) ҳисоб шудаанд (хатҳо 3 ва 4), васеъ буда, тақрибан 10°Xc -ро ташкил медиҳанд, дар ҳоле ки бо формулаҳои (9) ва (10) ин соҳа тангтаранд буда (хатҳо 1 ва 2) ба назарияи умумии релаксатсионӣ [10 ,11] мувофиқи мебошад.



Расм 6. Вобастагии модулҳои чандирии лағжишӣ $\mu(\omega)$ ва ҳаҷмӣ $K(\omega)$ барои метанол аз басомад барои температураҳои $t=30^\circ\text{C}$ (хатҳо 2 ва 4), $t=50^\circ\text{C}$ (хатҳо 1 ва 3) ва зичиҳои мутобиқ дар мавриди доимӣ будани $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=45^\circ$, $\xi_1-\xi_2=0^\circ$. Хатҳои 1 ва 2 бо формулаҳои (3) ва (4), хатҳои 3 ва 4 бо формулаҳои (9) ва (10) ҳисоб шудаанд.



Расми 7. Вобастагии модули чандирии релаксационӣ $K_r(\omega)$ аз кунҷҳои θ_1 ва θ_2 дар мавриди доимӣ мондани $\xi_1 - \xi_2 = 0^\circ$; (а) - барои спирти метил ҳангоми температураи $t=20^\circ\text{C}$ бо формулаи (4); (б) - барои спирти метил ҳангоми температураи $t=20^\circ\text{C}$ бо формулаи (10); (в) - барои об дар температураи $t=15^\circ\text{C}$

бо формулаи (4); (γ) - барои об дар температураи $t=15^{\circ}\text{C}$ бо формулаи (10) ҳисоб шудааст.

Аз ин рӯ, соҳаи дисперсияи басомадии хусусиятҳои часпакиночандирии моеъҳои қутбӣ бо табиати барқароршавии сохтори мувозинатӣ ва вобастагии мураккаб байни молекулаҳо, ҳамчунин бо таъсири омилҳои гуногун, ба мисли таъсири андоза ва ориентатсияи молекулаҳо саҳт алоқаманд аст.

Боби чорум ба таҳқиқоти хосиятҳои акустикии моеъҳои бисёратома ва қутбӣ бо дарназардошти табиати хомушшавии сели релаксатсионӣ бахшида шудааст, ки селҳои релаксионӣ бо қонунҳои дараҷавӣ ё экспоненсиалӣ хомуш мегарданд. Бо усули муодилаҳои кинетикӣ барои суръати $C(\omega)$ ва коэффиенти фурубурд $\alpha(\omega)$ мавҷи садо, ифодаҳои аналитикии зерин ба даст оварда шудаанд:

$$C(\omega) = C_S \left\{ 1 + \frac{1}{2\rho C_S^2} \left[\frac{4}{3} \mu(\omega) + K_r(\omega) \right] \right\}, \quad (27)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega^2}{2\rho C_S^3} \left[\frac{4}{3} \eta_s(\omega) + \eta_v(\omega) \right], \quad (28)$$

ки $C_S = \sqrt{\frac{K_S}{\rho}}$ - суръати адиабатӣ садои, ρ - зичии моеъ, $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$, ва $\mu(\omega)$, $K_r(\omega)$, $\eta_s(\omega)$ ва $\eta_v(\omega)$ мувофиқи формулаҳои (1)-(10) муайян мешаванд.

Натиҷаҳои ҳисобкунии рақамии коэффиенти фурубурди садо дар ҷадвали 3 ва 4 ва расмҳои 8–10 оварда шудаанд ва бо маълумотҳои таҷрибавӣ муқоиса карда шудаанд.

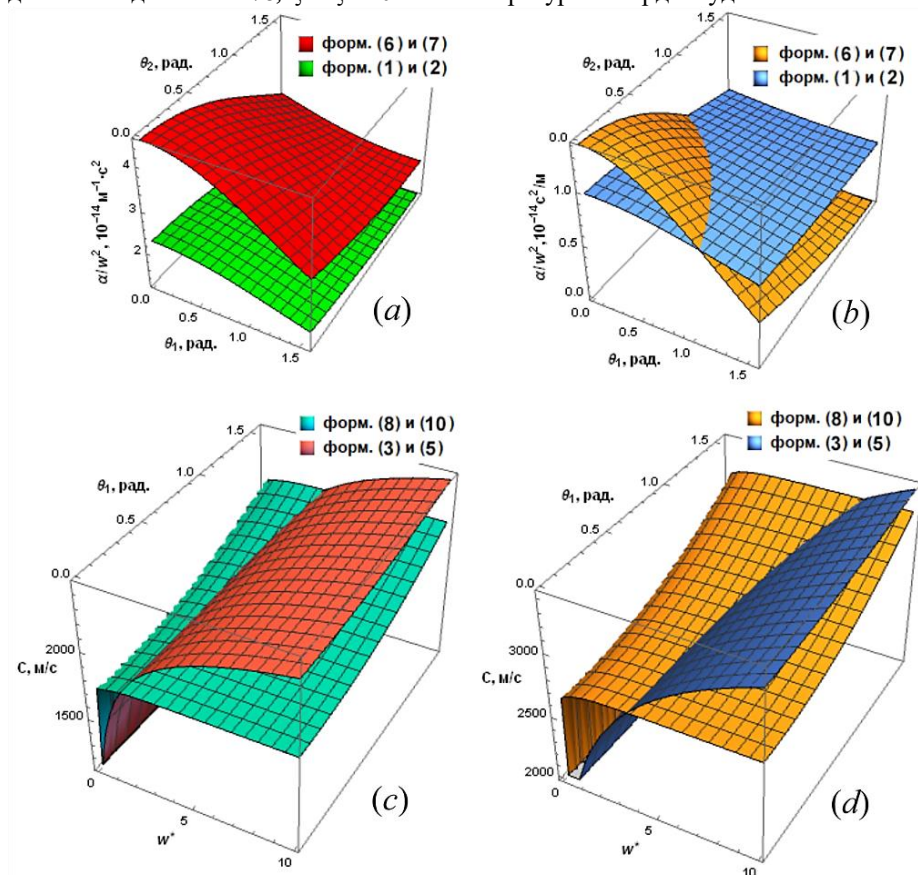
Ҷадвали 3

Вобастагии изобасомади коэффиенти фурубурди садо аз температура ва зичӣ барои об ($\omega^* = 10^{-5}$, $\theta_1 = \pi/6$, $\theta_2 = \pi/6$, $\xi_1 - \xi_2 = 0$).

t, °C [13]	ρ , кг/м ³ [13]	C_S , м/с [13]	$\alpha/\omega^2 \cdot 10^{14}$, м ⁻¹ ·с ² (форм. (28))		
			[13]	с учетом форм. (6) и (7)	с учетом форм. (1) и (2)
7	999,99	1434,92	4,280	1,154	1,336
10	999,73	1447,29	3,760	1,092	1,277
15	999,13	1465,96	3,070	1,000	1,189
25	997,07	1496,73	2,160	0,853	1,048
40	992,20	1528,89	1,510	0,697	0,894
50	988,00	1542,57	1,210	0,620	0,818

Дар ҷадвали 3 вобастагии қиматҳои коэффиенти фурубурди садо α/ω^2 аз температура ва зичӣ оварда шудаанд, ки бо формулаи (28) бо дарназардошти формулаҳои (1)-(2) ва (3)-(4) ҳангоми басомади $\omega^*=10^{-5}$ дар мавриди доимӣ мондани кунҷҳои $\theta_1=\pi/6$, $\theta_2=\pi/6$, $\xi_1-\xi_2=0$ ҳисоб шудааст. Аз ҷадвал дида мешавад, ки натиҷаҳои назариявии ҳосилшуда бо маълумоти таҷрибавӣ дар мувофиқати сифатӣ қарор доранд.

Дар расми 8 а, b вобастагии коэффисенти изобасомади коэффисенти фурубурди садо α/ω^2 барои спирти метилӣ ва об аз кунҷҳои θ_1 ва θ_2 дар мавриди доими мондани $\xi_1 - \xi_2 = 0^\circ$ ва температураи ва дар расми 8 с, d дисперсияи басомади суръати садо $C(\omega)$ барои спирти метилӣ ва об аз кунҷи θ_1 дар мавриди доимӣ мондани $\theta_2 = \pi/6$, $\xi_1 - \xi_2 = 0^\circ$ ва температураи оварда шудааст.



Расм 8. Вобастагии коэффисенти фурубурд α/ω^2 ва суръати $C(\omega)$ мавҷҳои садо аз кунҷҳои θ_1 ва θ_2 дар мавриди доими будани $\xi_1 - \xi_2 = 0^\circ$: (a) ва (b) - барои спирти метилӣ барои температураи $t=20^\circ\text{C}$; (c) ва (d) - барои об дар температураи $t=40^\circ\text{C}$.

Аз расми 8 маълум мешавад, ки коэффисенти фурубурд α/ω^2 ва суръати $C(\omega)$ паҳншавии садо аз қонуни фурубурди сели релаксатсионӣ аз ҳамдигар фарқ мекунад, ки ба ҳисоб гирифтани сахми равандҳои релаксатсионӣ мебошад.

Дар ҷадвали 4 ва 5 натиҷаҳои ҳисобҳои адабии вобастагии коэффисенти фурубурди мавҷҳои садо аз температура ва зичӣ оварда шудаанд, ки бо формулаи (28) ҳангоми басомади $\omega^* = 10^{-5}$ барои метани ва тетрафторметан оварда шудаанд.

Чадвали 4

Вобастагии коэффитсенти фурубурди садо аз температура ва зичӣ барои метани моеъ ($\omega^* = 10^{-5}$).

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

Чадвали 5

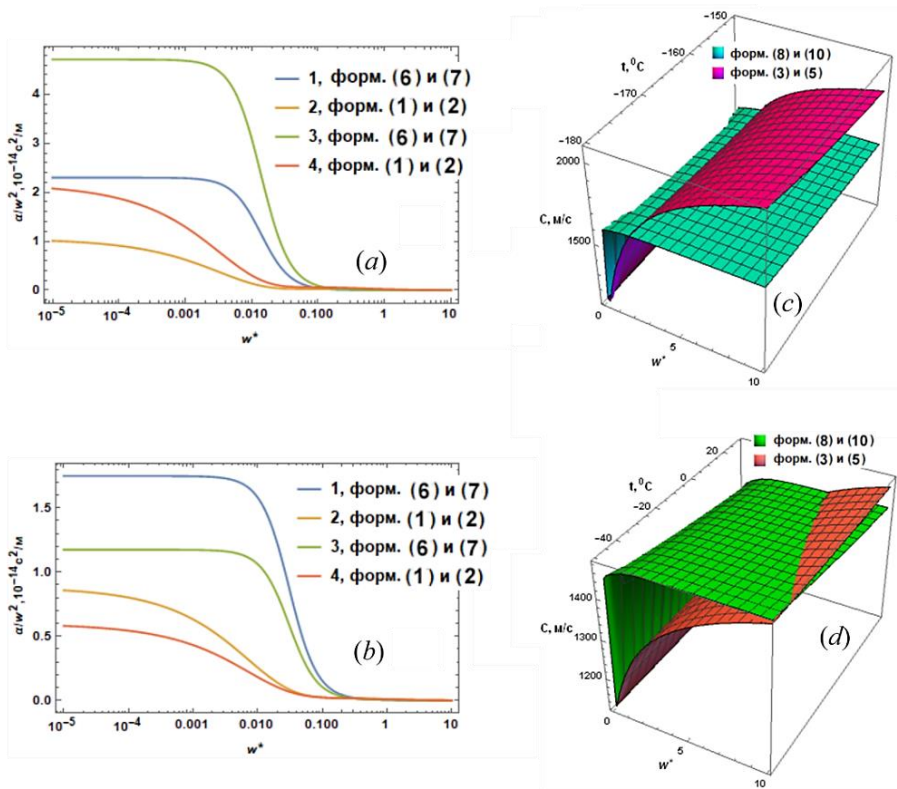
Вобастагии коэффитсенти фурубурди мавчи садо аз температура ва зичӣ барои тетрафторметан ($\omega^* = 10^{-5}$).

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

Аз чадвалҳои 4 ва 5 бармеояд, ки натиҷаҳои назариявии ба даст омада бо маълумоти таҷрибавӣ мувофиқати сифатӣ доранд.

Дар расмҳои 9 а, б натиҷаи ҳисобҳои адабии вобастагии басомадӣ коэффитсенти фурубурди мавчи садо α/ω^2 барои метан ва диоксида карбон барои ду температура нишон дода шудааст, ва дар расмҳои 9 с, d вобастагии басомадӣ ва температураи суръати садо $C(\omega)$ барои метани моеъ ва диоксида карбони моеъ тибқи формулаҳои (27) ва (28) бо дарназардошти қонунҳои диффузионӣ ва экспоненсиалӣ ҳомишшавии селҳои релаксатсионӣ оварда шудаанд.

Дар расми 9 соҳаи дисперсияи басомадии коэффисенти фурубурди мавҷҳои садо α/ω^2 ва суръати садо $C(\omega)$ бо истифода аз формулаҳои (1)-(5) ҳисоб гардида ва нишон дода шудааст, ки басомадӣ васеъ буда тақрибан 10^5 Ҳс -ро ташкил медиҳад. Аммо дар мавриди дар ҳисобҳои α/ω^2 ва $C(\omega)$ аз формулаҳои (6)–(10) истифода намудан, ҳудуди соҳаи дисперсияи танг гардида, тақрибан 10^2 Ҳс-ро ташкил медиҳад, ки ин натиҷа бо назарияи умумии релаксатсионӣ барои моеъҳо мувофиқ аст.



Рисми 9. Вобастагии коэффитсиенти фурубурд ва суръати садо аз басомад ва температура барои метани моеъ ва дуоксиди карбон: (а)-барои метани моеъ, хатҳои 1 ва 2 барои температураи 150 К ва хатҳои 3 ва 4 барои температураи 120 К; (б)- барои дуоксиди карбон, хатҳои 1 ва 2 дар температураи 110 К ва хатҳои 3 ва 4 дар температураи 170 К; (с)-барои метани моеъ; (д)- барои дуоксиди карбон.

Маълумотҳои бадастомада нишон медиҳанд, ки хосиятҳои акустикии моеъҳои қутбӣ ва бисёратома аз хомушшавии сели релаксатсионӣ ба таври гуногун вобастаанд, зеро табиати механизмҳои релаксатсионӣ, ки дар шаклгирии ин хосиятҳо саҳм мегузоранд, аз ҳам фарқ мекунад. Муайян шуд, ки чунин хосиятҳо на танҳо аз хосиятҳои ҳамтаъсиrotи байнимолекулавӣ, балки аз динамикаи барқароршавии сохтори тавозунӣ, таъсири сохтори ориентатсионии молекулаҳо ва таъсири падидаҳои андозавӣ низ муайян мешаванд.

Хулосаҳои умумӣ

1. Барои моеъҳои молекулаҳояшон сохтори сферӣ дошта, муодилаи зичии бинарии зарраҳо дар фазои конфигурасионӣ бароварда шуда ва ҳалли умумии он ёфта шудааст.

2. Бо назардошти конунҳои дараҷагӣ ва экспоненсиалӣ барои хомушшавии селҳо дар фазои импульс ва конфигурасионӣ, ифодаҳои аналитикӣ барои коэффитсентҳои часпакии лағжиш ва ҳаҷмӣ ва инчунин модулҳои чандирии лағжиш ва ҳаҷмӣ моёъҳо ба даст оварда шуданд.

3. Хосиятҳои динамикии часпакиючандирӣ ва акустикии моёъҳои қутбӣ бо назардошти сохтори молекулавии онҳо таҳлил карда шуданд, ки барои ин потенциали ҳамтаъсироти байнимолекулавӣ $\Phi_{ab}(r, \theta_a, \theta_b, \xi_a - \xi_b)$ ҳамчун ҳамтаъсироти молекулаҳои қутбӣ бо моменти диполии калон интиҳоб шудааст. Барои моёъҳои бисёратома, яъне моёъҳои ғайриқутбии молекулаҳояшон квазисферӣ, потенциали Леннард-Чонс истифода гардид. Дар ин маврид, функсияи тақсимои радиалӣ $g(r)$ ва функсияи тақсимои бинарии ду хат $u(r^*)$ ба се фосила тақсим шудаанд: дар фосилаи $0 < r < \sigma$ ифодаи Карнахан–Старлинг истифода шудааст; дар фосилаи $1 < r < 2$ ифодаи Вертхейм; дар фосилаи $2 < r < 5$ функсияи тақсимои бинарии ду хат хурд ҳисобида шуда, ба назар гирифта намешавад.

4. Ҳисобҳои рақамӣ барои коэффитсентҳои часпакиючандирӣ ҳаҷмӣ ва лағжиш ва модулҳои чандирии лағжиш ва ҳаҷмӣ барои моёъҳои бисёратома ва қутбӣ дар соҳаи васеи зичӣ, температура ва басомад анҷом дода шуданд. Нишон дода шуд, ки соҳаи дисперсияи басомади моёъҳои таҳқиқшуда бо механизми диффузионӣ васеъ (тақрибан 10^5 Ҳс) буда, дар мавриди қонуни экспоненсиалии хомушшавии селҳои релаксатсионӣ соҳаи дисперсияи басомади тангтар (тақрибан 10^2 Ҳс) аст, ки ба натиҷаҳои назарияи феноменологии релаксатсионӣ мувофиқ аст.

5. Ҳисобҳои рақамӣ барои суръати паҳншавӣ ва коэффитсенти фурубурди мавҷҳои акустикӣ барои моёъҳои бисёратома ва қутбӣ вобаста аз температура, зичӣ ва ориентасияи қунҷии молекулаҳо (барои моёъҳои қутбӣ) анҷом дода шуданд. Минтақаҳои дисперсияи басомади хосиятҳои акустикии моёъҳои бисёратома бо молекулаҳои квазисферӣ ва моёъҳои қутбӣ бо назардошти саҳми селҳои хомушшавии релаксатсионӣ муайян шуданд. Натиҷаҳои ба даст омада бо маълумотҳои таҷрибавӣ муқоиса карда шуданд.

Тавсияҳо оид ба истифодаи амалии натиҷаҳо

Дар ин қор назарияе барои ҳолати моёъ пешниҳод шудааст, ки дар асоси усули кинетикаи молекулавӣ ба равандҳои динамикӣ ҳосил шуда, табиати механизмҳои дохилии релаксатсияро дар моёъҳо ошкор мекунад, инчунин таъсири онҳо ба хусусиятҳои динамикии часпакиючандирӣ ва акустикии моёъҳои бисёратома ва қутбиро таҳлил менамояд. Дар раванди таҳқиқот ориентатсияҳои қунҷии молекулаҳои мураккаб ва таъсири равандҳои дохилии релаксионӣ, ки дар моёъҳо дар соҳаи васеи тағйирёбии параметрҳои термодинамикӣ ва басомади таъсироти беруна рух медиҳанд, ба назар гирифта шудаанд. Натиҷаҳои ҳисобкунии ададӣ пойгоҳи маълумоти мавҷуда оид ба хусусиятҳои часпакию-чандирӣ ва акустикии моёъҳои таҳқиқшавандаро васеъ намуда, имкон медиҳанд, ки рафтори онҳоро дар шароитҳои гуногуни эксплуататсионӣ ба назар гирифта, вобастагии хусусиятҳои часпакиючандирӣ ва акустикии ин моёъҳоро аз сохтори молекулавии онҳо муайян менамоянд, ки

барои истифодаи шартҳои кори равандро ва таҷҳизоти гуногун мусоидат мекунад.

Маводҳои диссертатсия метавонанд барои донишҷӯёни факултатҳои физика, химия ва дигар ихтисосҳои хангоми иҷроии корҳои дипломӣ, инчунин барои магистрон, донишҷӯён, докторантони PhD ва аспирантон дар вақти иҷроии корҳои илмӣ муфид бошанд.

Мақолаҳо оид ба мавзӯи диссертатсия

[1-А] Баладжонзода, С.Д. Частотная дисперсия вязкоупругих свойств полярных жидкостей в случае экспоненциального закона затухания релаксирующих потоков / С.Одинаев, Д.М. Акдодов, С.Д.Баладжонзода // Известия НАН Таджикистана. Отдел. физ.-мат., хим., геол. и тех. наук, 2024.- №1(194).-С. 41-49.

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

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

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

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

Мақолаҳое, ки дар нашриҳои дигар оид ба мавзӯи диссертатсия ҷой шуд

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

Нашриҳо дар маводи конференсиҳои илмӣ

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

[8-А] Балаҷонзода, С.Д. Хосиятҳои часпакии моеъҳои кутбӣ аз параметрҳои термодинамикии ҳолат /С.Д. Балаҷонзода // Маводҳои конференсияи ҷумҳуриявӣ илмӣ-амалӣ «Ҳамбастагии илм бо истеҳсолот дар

раванди саноаткунонии босуръати Ҷумҳурии Тоҷикистон», Қисми 1., Душанбе, 2022, (22-23 апрели 2022г.) С.129-131.

[9-А] Балаҷонзода, С.Д. Таҳқиқи коэффиенти часпакии моеъҳои кутбӣ бо саҳми равандҳои релаксационӣ / С. Одинаев, С.Д. Балаҷонзода // Маводҳои конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ амалӣ «моделсозии математикӣ ва компютерии равандҳои физикӣ» бахшида ба «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф», Душанбе, 9 февралӣ 2023 года, 47-51.

[10-А] Балаҷонзода, С.Д. Исследование вязкостные свойства полярных жидкостей с учетом релаксационных процессов / С. Одинаев, Д.М.Ақдодов, С.Д.Балаҷонзода// Маҷмӯи маводҳои конференсияи байналмилалӣ илмӣ амалӣ «Комёбҳои нав дар соҳаи илмҳои табиатшиносӣ ва технологияҳои иттилоотӣ», бахшида ба «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар солҳои 2020-2040 гг.». Душанбе: нашр. «РТСУ», 2023, (30 майи 2023г.), с. 84-86.

[11-А] Балаҷонзода, С.Д. Исследование частотной дисперсии динамических модулей упругости полярных жидкостей в случае экспоненциального закона затухания релаксирующих потоков / С. Одинаев, Д.М.Ақдодов, С.Д.Балаҷонзода// Маводҳои конференсияи байналмилалӣ илмӣ-амалӣ дар мавзӯи «Масоили муосири физика ва химияи полимерҳо» бахшида ба «75-солагии таъсисёбии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон» ва «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф (солҳои 2020-2040)», Душанбе, 10 октябри 2023, с.134-138.

[12-А] Балаҷонзода, С.Д. Расчет скорости распространения звука в полярных жидкостях / Д.М.Ақдодов, С.Д.Балаҷонзода // Маводҳои конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ амалӣ «Мушкилот ва тамоюлҳои рушди илмҳои дақиқ, математика ва табиатшиносӣ», бахшида ба «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф (2020-2040 гг.)». 28 майи 2024 года. с. 296-299.

[13-А] Балаҷонзода С.Д. Исследование частотной дисперсии коэффициента поглощения звука полярных жидкостей / Д.М.Ақдодов, С.Д.Балаҷонзода // Конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ-амалӣ таҳти унвони «Муаммоҳои мубрами физикаи ҳолатҳои конденсӣ» бахшида ба 35- солагии истиқлоли давлатии Ҷумҳурии Тоҷикистон ва “Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф” ва 80-солагии профессор Шерматов М., 85-солагии профессор Ҷамолов М. Хучанд, 20-21 майи 2024. с. 27-30.

[14-А] Балаҷонзода, С.Д. Вязкоупругие свойства полярных жидкостей в случае степенного закона затухания релаксирующих потоков / Д.М.Ақдодов, С.Д.Балаҷонзода // Маводҳои конференсияи илмӣ байналмилалӣ “Илмҳои физикӣ ва техника дар фазои ИДМ: масъалаҳо ва дурнамои рушд”, 29–30 ноябр 2024. с. 51-55.

[15-А] Балаҷонзода, С.Д. Релаксационные процессы и вязкоупругих свойств полярных жидкостей / Д.М.Ақдодов, С.Д.Балаҷонзода // Маводҳои

Конференсия байналмиллалии илмӣ-амалӣ таҳти унвони «Муаммоҳо ва дурнамои рушди илми физика», Худжанд, 11-12-уми март 2025. с. 226-231.

[16-А] Баладжонзода, С.Д. Зависимость вязкостных свойств многоатомных жидкостей от параметров состояния / Д.М.Акдодов, С.Д.Баладжонзода // Маводҳои конференсия байналмиллалии илмӣ-амалӣ дар мавзӯи «Масоили муносири физикаи нимоқилҳо ва диэлектрикҳо» бахшида ба «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ барои солҳои 2020-2040» дар соҳаи илм ва маориф ва «35 - солагии кафедраи электроникаи физикӣ». Душанбе, 30 апреля 2025. с. 114-119.

Феҳрасти манбаҳои истифодашуда

1. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей // М.: ИЛ, 1961.-930 с.
2. Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы // М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012.-394 с.
3. Осипов О.А., Минкин В.И., Гарновский А.Д. Справочник по дипольным моментам // М: «Высшая школа», 1971.-416 с.
4. Юхновский И.Р., Головкин М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем // Киев: Наукова думка, 1980.-372 с.
5. Odinaev S., Akdodov D., Mirzaminov Kh. Study of frequency dispersion of shear and bulk viscosity coefficients for liquid argon, krypton and xenon under different parameters of state // Journal of Molecular Liquids, 2011.-V.164.-No.1-2.-P. 22–28.
6. Wertheim M.S. Exact solution of the Percus-Yevick integral equation for hard spheres. – Phys. Rev. Lett., 1963, 10, № 8, p. 321-323.
7. Smith W.R., Henderson D.J. Analytical representation of the Percus-Yevick hard sphere radial distribution function. – Molecular Physics, 1970, 19, № 3, p. 441-446.
8. Одинаев С., Адхамов А.А. Молекулярная теория структурной релаксации и явлений переноса в жидкостях // Душанбе: Дониш, 1998.-230 с.
9. Рид Р., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей // Л: «Химия», 1971.-709 с.
10. Михайленко С. А., Дударь Б. Г. Акустическая релаксация в жидком метане и тетрафторметане // Физика низких температур, 1976.-Т.2.-№1.-С.93–104.
11. Литовиц Т. Структурная и сдвиговая релаксация в жидкостях. [Физическая акустика, 11, часть А. под ред. У. Мэзона] / Т. Литовиц, К. Дэвис // М.: «Мир», 1968.-С.298-370.
12. Михайлов И.Г., Соловьев В.А., Сырников Ю.П. Основы молекулярной акустики // М.: Наука, 1964.-514 с.
13. Holmes M.J., Parker N.G., Povey M. J. Temperature dependence of bulk viscosity in water using acoustic spectroscopy // Journal of physics. Conference series, 2011-01, Vol.269 (1), p.012011-7.

АННОТАЦИЯ

диссертации Баладжонзода Сулаймонджона Додарджон на тему «Исследование вязкоупругих и акустических свойств квазисферических и полярных жидкостей», представленной на соискание ученой степени доктора философии (PhD) – доктора по специальности 6D060400-Физика (6D060402-Теоретическая физика)

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

Целью работы является развитие и применение метода кинетического уравнения для исследования динамических вязкостных и акустических характеристик полярных и многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами.

Объектами исследования являются динамические вязкоупругие и акустические свойства многоатомных жидкостей с квазисферическими молекулами и полярных жидкостей.

Методы исследования. Методы кинетического уравнения, численных расчетов с применением современных компьютерных программных средств, а также другие подходы, позволяющие моделировать и анализировать динамические и акустические свойства жидкостей. Перечисленные методы позволяют корректно вычислять любые задаваемые параметры и детально исследовать их зависимости от различных внешних и внутренних факторов.

Научная новизна исследования. Рассчитаны коэффициент трения и времена релаксации для квазисферических и полярных жидкостей с учётом конкретных межмолекулярных потенциалов. Установлено, что область частотной дисперсии вязкостей, модулей упругости и акустических характеристик определяется природой затухания релаксирующих потоков: диффузионное затухание даёт широкую дисперсию, экспоненциальное - узкую. Определены характерные частотные зависимости модулей упругости и вязкостей в низко- и высокочастотных областях для обоих механизмов.

Область применения. Разработанная теория и полученные расчёты могут использоваться для анализа и прогнозирования вязкоупругих и акустических свойств многоатомных и полярных жидкостей в широком диапазоне изменений термодинамических параметров и частоты внешних воздействий, что важно для оптимизации технологических процессов и работы различных устройств. Материалы также полезны студентам и исследователям в области физики, химии и смежных наук при выполнении научных и учебных проектов.

АННОТАТСИЯИ

диссертатсияи Балачонзода Сулаймончони Додарчон дар мавзуи “Омӯзиши хосиятҳои часпакию чандирӣ ва акустикии моеъҳои квазисферавӣ ва қутбӣ” барои дарёфти дараҷаи илмӣ доктори фалсафа (PhD) - доктор аз рӯи ихтисоси 6D060400-Физика (6D060402 - Физикаи назариявӣ)

Калидвожаҳо: моеъҳои бисёратома ва қутбӣ, функцияи тақсимот, потенциалҳои ҳамтаъсирот, сел, релаксатсия, акустика.

Мақсади ин рисола инкишоф ва татбиқи усули муодилаҳои кинетикӣ барои омӯзиши хосиятҳои динамикии часпакӣ ва акустикии моеъҳои қутбӣ ва бисёратомаи молекулаҳояшон тақрибан сферӣ иборат мебошад.

Объекти омӯзиш. Объекти таҳқиқот хосиятҳои динамикии часпакиючандирӣ ва акустикии моеъҳои бисёратомаи молекулаҳояшон квазисферӣ ва моеъҳои қутбӣ мебошанд.

Усулҳои тадқиқот. Усули таҳқиқот, усулҳои муодилаи кинетикӣ, ҳисобҳои ададиро бо истифода аз барномаҳои муосири компютерӣ ва дигар равандҳоро дар бар мегирад, ки онҳо имкон медиҳанд хосиятҳои динамикӣ ва акустикии моеъҳоро моделсозӣ ва таҳлил кунанд. Усулҳои зикршуда имконият медиҳанд, ки ҳар гуна параметрҳои додашударо дуруст ҳисоб карда, вобастагӣҳои онҳоро аз омилҳои гуногуни беруни ва дохилӣ бо тафсил таҳқиқ карда шавад.

Навовариҳои илмӣ тадқиқот. Коэффитсиенти соиш ва вақтҳои релаксатсия барои моеъҳои квазисферӣ ва қутбӣ бо назардошти потенциалҳои ҳамтаъсироти байнимолекулавӣ ҳисоб карда шуданд. Муайян шуд, ки соҳаи дисперсияи басомадии хосиятҳои часпакӣ, чандирӣ ва акустикӣ аз хусусияти хомушшавии селҳои релаксатсионӣ вобастаанд: дар мавриди хомушшавии диффузионӣ дисперсияи васеъро ба вучуд меорад, дар ҳоле ки хомушшавии экспоненсиалӣ дисперсияи тангро ба вучуд меорад. Вобастагии хоси басомади модулҳои чандирӣ ва часпакӣ дар соҳаҳои басомади паст ва баланд барои ҳарду механизм муайян карда шуданд.

Соҳаи татбиқ. Назарияи таҳияшуда ва ҳисобҳои бадастомада метавонанд барои таҳлил ва пешгӯии хосиятҳои часпакӣю чандирӣ ва акустикии моеъҳои бисёратомӣ ва қутбӣ дар соҳаи васеи параметрҳои термодинамикӣ ва басомадҳои анғезандаи беруна истифода шаванд, ки барои беҳсозии равандҳои технологӣ ва кори дастгоҳҳои гуногун муҳим аст. Маводҳо инчунин барои донишҷӯён ва муҳаққиқони соҳаи физика, химия ва илмҳои марбута ҳангоми гузаронидани тадқиқот ва лоиҳаҳои таълимӣ муфиданд.

ABSTRACT

of the dissertation by Balajonzoda Sulaymondjon Dodardjon titled “Investigation of Viscoelastic and Acoustic Properties of Quasispherical and Polar Liquids”, submitted for the degree of Doctor of Philosophy (PhD) in the specialty 6D060400 – Physics (6D060402 – Theoretical Physics)

Keywords: polyatomic and polar liquids, distribution function, interaction potential, flux, relaxation, acoustics.

The purpose of the dissertation is to develop and apply the kinetic equation method to study the dynamic viscous and acoustic characteristics of polar and polyatomic liquids with quasispherical molecules.

The **objects of research** are the dynamic viscoelastic and acoustic properties of polyatomic liquids with quasispherical molecules and polar liquids.

Research methods. The study employs the kinetic equation method, numerical calculations using modern computational software, and additional approaches that enable modeling and analysis of the dynamic and acoustic properties of liquids. These methods allow accurate computation of any required parameters and detailed investigation of their dependence on various external and internal factors.

Scientific novelty of the study. The friction coefficient and relaxation times for quasispherical and polar liquids have been calculated with consideration of specific intermolecular potentials. It has been established that the frequency dispersion ranges of viscosities, elastic moduli, and acoustic characteristics are determined by the nature of the decay of relaxing fluxes: diffusive decay results in a wide dispersion range, while exponential decay produces a narrow one. Characteristic frequency dependences of the elastic moduli and viscosities in both the low- and high-frequency regions have been identified for both relaxation mechanisms.

Scope. The developed theory and the obtained calculations can be used to analyze and predict the viscoelastic and acoustic properties of polyatomic and polar liquids over a wide range of thermodynamic parameters and external frequencies, which is essential for optimizing technological processes and the operation of various devices. The materials are also useful for students and researchers in physics, chemistry, and related fields when conducting academic or scientific work.