На правах рукописи

Абдул Рахим Рахими

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ТЕОРИЯ ТЕРМИЧЕСКИХ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ И ДИНАМИЧЕСКИХ ВЯЗКОУПРУГИХ СВОЙСТВ АСИММЕТРИЧНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Специальность: 01.04.07- Физика конденсированного состояния

А В Т О Р Е Ф Е Р АТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико–математических наук

Душанбе- 2017

Работа выполнена в секторе теоретической физики Физико-технического института им. С.У.Умарова АН Республики Таджикистан.

Научный руководитель:	**Абдурасулов Анвар Абдурасулович**- кандидат физико-математических наук, доцент
Официальные оппоненты:	**Лебедев Виктор Иванович**-доктор физико-математических наук, профессор кафедры информатики Института информационных технологий и телекоммуникаций Северо-Кавказского Федерального университета (Ставрополь, Россия); **Низомов Зиёвуддин**- доцент кафедры естественнонаучных дисциплин Филиала Национального исследовательского технологического университета «МИСиС» в г. Душанбе.
Ведущая организация:	Таджикский государственный педагогический университет им. С.Айни

Защита состоится **«__30__» __января 2018__ г. в 10^{00} час.** на заседании объединенного диссертационного совета Д 999.188.02 по защите докторских и кандидатских диссертаций при Таджикском национальном университете по адресу: 734025, Республика Таджикистан, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17, факс (992-372) 21-77-11. Зал заседаний Ученого совета ТНУ.

Отзывы направлять по адресу; 734025, Республика Таджикистан, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17, ТНУ, диссертационный совет Д999.188.02, E.mail:tgnu@mail.tj.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ТНУ.

Автореферат разослан «_____» ____________20____г.

Ученый секретарь объединённого
диссертационного совета Д 999.188.02,
кандидат физ.-мат наук, СНС Табаров С.Х.

Общая характеристика работы

Актуальность. В реальных условиях эксплуатации, особенно при использовании жидкостей в качестве рабочего материала в авиационно-космических аппаратах, атомных и тепловых электростанциях, и в ряде других динамических технологических процессах, они подвергаются разного рода внешним воздействиям, в том числе, высокочастотным и высокоинтенсивным возмущениям. Исследования показывают, что динамические вязкоупругие свойства жидкостей в высоко-частотных динамических процессах существенно отличаются от таковых при медленных и статических процессах. В первом случае они сильно зависят, как от природы происходящих в жидкостях внутренних релаксационных процессов, так и от характера (частоты) действующих внешних возмущений.

Если описать неравновесные свойства жидкостей, в частности их вязкоупругие свойства, методами обычной гидродинамики, значения их вязкоупругих коэффициентов остаются неопределенными, а механизмы происходящих в них релаксационных процессов не выясненными.

Для более полного и корректного описания динамических вязкоупругих свойств жидкостей в широком диапазоне изменения частоты возмущения и термодинамических параметров состояния, необходимо исходить из уравнения обобщенной гидродинамики, которые формулируются из общих принципов молекулярно-статистической теории жидкостей.

Однако до настоящего времени единой, последовательной и строгой молекулярно-статистической теории жидкого состояния, позволяющей описать неравновесные динамические свойства жидкостей в широком диапазоне изменения частоты внешнего возмущения и термодинамических параметров состояния, особенно для сложных жидких систем, пока не существует.

Следовательно, развитие молекулярно-статистической теории неравновесных процессов в сложных жидких системах, изучение и анализ механизмов внутренних релаксационных процессов в них, определение вклада последних в динамические вязкоупругие свойства жидкостей в широком диапазоне изменения параметров состояния и частоты внешнего возмущения является актуальной задачей теории жидкого состояния и представляют большой научный и практический интерес.

Состояние вопроса. Несмотря на существующие сложности, молекулярно-статистическая теория жидкостей интенсивно развивается и достигла заметных результатов [1-5]. Особенно большие успехи достигнуты в области теории равновесного состояния жидкостей [1]. Имеются определенные достижения и в создании статистической теории неравновесных процессов в жидкостях [2-6]. Сформулированы кинетические уравнения для одночастичных и двухчастичных функций распределения [2,5], которые позволяют описать неравновесные свойства плотных газов и жидкостей. В [5] построены сглаженные по мелкомасштабным флуктуациям кинетические уравнения для одночастичных и двухчастичных функций распределения и исследованы динамические вязкоупругие и термоупругие свойства простых жидкостей с учетом вкладов структурной и трансляционной релаксаций.

В последние годы, наряду с другими методами описания неравновесных свойств жидкостей, успешно применяется метод неравновесной функции распределения (НФР) [6] свободный от некоторых ограничений, присущих другим методам описания неравновесных явлений в жидкостях.

Цель работы заключается в теоретическом иследовании динамических вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей.

Для достижения поставленной цели были сформулированы и решены следующие задачи:

-обобщение метода НФР для описания вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей, состоящих из жестких молекул произвольной формы;

-вывод уравнений обобщенной гидродинамики, позволяющих описать динамические вязкоупругие свойства рассматриваемой модели асимметричных жидкостей с учетом особенности их молекулярной структуры и происходящих в них внутренних релаксационных процессов;

-исследование природы внутренних термических релаксационных про-цессов и определение их вкладов в динамические вязкоупругие характеристики асимметричных жидких систем;

-вывод общих аналитических выражений для обобщённых динамических коэффициентов вязкости и соответствующих им динамических модулей упру-гости, корректно учитывающих вклады структуры жидкости и характера внутренних термических релаксационных процессов;

-выбор равновесных параметров жидкостей и алгоритм решения задач на ЭВМ, проведение численного расчета зависимостей динамических вязкоупругих параметров конкретных моделей асимметричных жидкостей от термодинамических параметров состояния и частоты внешнего возмущения.

Объектом исследования являются динамические вязкоупругие процессы в сложных жидких системах с несферическими молекулами.

Основу теоретических и методологических исследований в диссертационной работе составляют современные методы молекулярно-статистической теории жидких систем, главным образом метод НФР.

<u>Научная новизна и выносимые на защиту положения</u>:

-выражение для НФР пригодное для описания динамических вязкоупругих свойств асимметричных жидких систем с учетом вклада особенностей их молекулярной структуры;

- система уравнений обобщенной гидродинамики для исследования динамических вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей с учётом вкладов термических релаксационных процессов;

- общие аналитические выражения для динамических коэффициентов объемной и сдвиговой вязкостей и соответствующих им динамических модулей объемной и сдвиговой упругостей асимметричных жидкостей с учётом вкладов поступательных и вращательных степеней свободы несферических молекул и термических релаксационных процессов;

-асимптотическое поведение динамических вязкоупругих параметров жидкостей в областях предельно высоких и предельно низких частот внешнего возмущения;

-численный расчёт зависимостей динамических вязкоупругих параметров конкретных простых моделей асимметричных жидкостей от температуры, плотности, давления и частоты внешнего возмущения.

Практическое значение. Полученные результаты могут быть использованы для определения динамических вязкоупругих и теплофизических характеристик простых и асимметричных жидкостей в широком диапазоне изменения частоты и параметров состояния. Вычисленные значения вязкоупругих параметров можно использовать как банк данных по вязкоупругим и теплофизическим параметрам жидкостей в динамических процессах. Аналитические выражения и численные значения характерных времен релаксации и динамических вязкоупругих параметров жидкостей можно использовать для анализа и определения других неравновесных характеристик сложных и простых жидких систем.

Приведенные в диссертации материалы могут быть полезны аспирантам, работающим в областях теплофизики и молекулярной физики, физики конденсированного состояния. Они могут быть использованы для чтения спецкурсов, выполнения курсовых и дипломных работ студентам физических, физико-химических и технических специальностей высших учебных заведений.

Апробация работы. Основные результаты работы были доложены на: Межд. науч. конф. по «Физике конденсированного состояния» (Душанбе , 2004г.); 3rd International Conference PLMMP (Kyiv 2005); Межд. конф. по физике конденсированного состояния и экологических систем», Душанбе 5-6 октября 2004 г. и 30-31 октября 2006 г.; Научно-теоретической конф. «Современные проблемы физики и астрофизики», Душанбе 2005 г.; Межд.

конф. «Вклады Авиценны и Эйнштейна в развитии естествознания», посвящ. 100-летию СТО Эйнштейна, г. Кургантюбе (Таджикистан) 2005г.; Научно-теоретической конф. профессорско-преподавательского состава Таджикского государственного национального университета (Душанбе 2006г.); Республиканской научно-практической конф. «Проблемы металлургии Таджикистана и пути их решения» (29-30 апреля 2016.) ,Филиал НИТУ «МИСиС» в г .Душанбе; VIII Межд. научно-практической конф. «Перспективы развития науки и образования», 3-4 ноября 2016г., г. Душанбе; V Межд. конф. «Современные проблемы физики», ФТИ им.С.У. Умарова АН РТ, 18-19 ноября 2016г., г. Душанбе; на научных физических семинарах Таджикского национального университета, Физико - технического института имени С.У. Умарова АН РТ, Душанбинского государственного педагогического университета имени С. Айни, Таджикского технического университета имени М. С. Осими.

Личный вклад автора заключается в непосредственном участии во всех этапах подготовки диссертации, начиная с составления литературного обзора, постановки задачи исследования и кончая выводов основных уравнений динамических вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей, обсуждении и обобщении результатов, подготовке основных публикаций по работе.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 15 научных трудах, 4 из которых опубликованы в рецензируемых журналах из Перечня ВАК РФ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитированной литературы. Содержание диссертации изложено на 131 страницах машинописного текста, 18 рисунков и 5 таблиц. Список литературы содержит 132 ссылок.

Ключевые слова: неравновесные процессы, асимметричные жидкости; вязкоупругость, динамика, релаксация, статистический ансамбль, простые жидкости, нематические жидкие кристаллы.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обосновывается актуальность темы, определяется цель и задачи диссертационной работы, кратко характеризуется состояние исследуемого вопроса, приводятся научная новизна и практическая значимость полученных результатов, дается краткая аннотация содержания глав диссертации.

В первой главе приведен краткий обзор состояния экспериментальных и теоретических работ по вязкоупругим свойствам жидкостей. Большое внимание уделяется экспериментальным и теоретическим работам, в которых изучены вклады релаксационных (трансляционных, вращательных и структурных) процессов в вязкоупругие свойства жидкостей. Приводятся исходные уравнения, составляющие теоретические основы используемых в диссертационной работе методов исследования динамических вязкоупругих свойств асимметричных жидких систем.

Во второй главе производится обобщение метода НФР [6] для описания динамических вязкоупругих свойств асимметричных жидких систем.

В первом параграфе рассматривается жидкая система, состоящая из N одинаковых жестких молекул произвольной формы с массами m и моментом инерции $I_{\alpha\beta}$. Полагается, что такие молекулы обладают только поступательным и вращательным степенями свободы, состояние которых можно описать законами классической физики.

Для определения состояния таких несферических молекул в фазовом пространстве используется набор декартовых координат $\vec{x}_i\{x_i; y_i; z_i\}$, определяющих положения центра инерции молекул, угловых координат $\vec{\theta}_i\{\theta_i; \varphi_i; \psi_i\}$, определяющих ориентацию несферических молекул в пространстве (например, углы Эйлера), а также набор соответствующих этим координатам компонент импульса $\vec{p}_i\{p_{xi}; p_{y_i}; p_{zi}\}$ и собственного момента импульса молекул $\vec{M}_i\{M_{xi}; M_{yi}; M_{zi}\}$.

Полагается, что неравновесное состояние жидкой системы характеризуется набором динамических величин $\hat{P}_m(\vec{x},\vec{\theta})$, локальную плотность которых можно задавать в виде

$$\hat{P}_m(\vec{X},\vec{\theta}) = \sum_i^N P_{mi}(\vec{x}-\vec{x}_i)\delta(\vec{\theta}-\vec{\theta}_i), \qquad (1)$$

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

Изменение состояния жидкости в фазовом пространстве описывается изменением плотности динамических величин $\hat{P}_m(\vec{x},\vec{\theta})$ по времени, уравнения которых имеют вид известных законов сохранения

$$\frac{\partial \hat{P}_m(\vec{x},\vec{\theta})}{\partial t} + \frac{\partial \hat{J}^{\alpha}_{mt}(\vec{x},\vec{\theta})}{\partial x^{\alpha}} + \frac{\partial\left(a^{\alpha\beta}\hat{J}^{\alpha}_{mr}(\vec{x},\vec{\theta})\right)}{\partial \theta^{\alpha}} = \hat{I}(\vec{x},\vec{\theta}). \qquad (2)$$

Здесь $\hat{J}^{\alpha}_{mt}(\vec{x},\vec{\theta})$ и $\hat{J}^{\alpha}_{mr}(\vec{x},\vec{\theta})$ - соответствующие компоненты вектора локальной плотности потоков переноса $\hat{P}_m(\vec{x},\vec{\theta})$, обусловленные поступательными (t) и вращательными (r) степенями свободы несферических молекул, $\hat{I}(\vec{x},\vec{\theta})$ - локальная плотность соответствующих источников.

Чтобы из уравнения типа (2) получить уравнения обобщенной гидродинамики и исследовать неравновесные свойства жидких систем, необходимо усреднять их по соответствующему неравновесному статистическому ансамблю. Обобщая результаты [6], для описания асимметричных жидкостей НФР в линейном приближении напишем в виде

$$f_t = f_L\left(1 - \sum_m \iint\left[\int_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t_1}\left[F_m(\vec{x},t+t_1)\frac{\partial \hat{P}_m(\vec{x},\vec{\theta},t_1)}{\partial t_1} + \hat{P}_m(\vec{x},\vec{\theta},t_1)\frac{\partial F_m(\vec{x},t+t_1)}{\partial t_1}\right]dt_1 d\vec{x} d\vec{\theta}\right), \qquad (3)$$

где, $f_L = Q_L^{-1}\exp\left(-\sum_m \iint F_m(\vec{x},t)\hat{P}_m(\vec{x},\vec{\theta})d\vec{x}d\vec{\theta}\right)$-локально-равновесная функция распределения молекул. Входящие в (3) неизвестные макроскопические параметры $F_m(\vec{x},t)$ определяются из условия

$$\langle \hat{P}_m(\vec{x},\vec{\theta})\rangle_t = \langle \hat{P}_m(\vec{x},\vec{\theta})\rangle_L. \qquad (4)$$

Во втором параграфе формулируются уравнения баланса для плотности динамических величин, характеризующих неравновесное состояние жидкой системы. В отличие от [6], здесь, для корректного описания несферических молекул, используются угловые переменные и число динамических величин, характеризующих неравновесное состояние жидкой системы, значительно расширяется. Наряду с сохраняющимися величинами динамической плотности числа частиц $\hat{n}(\vec{x},\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\vec{x}_i - \vec{x})\delta(\vec{\theta}_i - \vec{\theta})$ и динамической плотности энергии

$$\hat{H}(\vec{x},\theta) = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\breve{P}_i^2}{2m} + \frac{\breve{M}_i^{\alpha}\breve{M}_i^{\beta}}{2I_{\alpha\beta}} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N} \Phi_{ij}(\vec{x}_{ij},\vec{\theta}_i,\vec{\theta}_j) \right)\delta(\vec{x}-\vec{x}_i)\delta(\vec{\theta}-\vec{\theta}_i) \tag{5}$$

здесь, для описания неравновесного состояния асимметричных жидкостей, используются ещё и динамические плотности компонент вектора потоков числа частиц - $\hat{\vec{J}}_t(\vec{x},\vec{\theta})$ и $\hat{\vec{J}}_r(\vec{x},\vec{\theta})$, компоненты динамической плотности тензоров потоков импульса и момента импульса - $\hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})$, $\hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})$, $\hat{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})$, $\hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})$, компоненты вектора плотности потока энергии - $\hat{\vec{S}}_t(\vec{x},\vec{\theta})$, $\hat{\vec{S}}_r(\vec{x},\vec{\theta})$, обусловленные поступательными (t) и вращательными (r) степенями свободы несферических молекул, а также взаимодействием этих степеней свободы (tr) и (rt). В (5) $\breve{\vec{P}}_i = \vec{P}_i - m\vec{u}(\vec{x},t)$ и $\breve{\vec{M}}_i = \vec{M}_i - I:\vec{\omega}(\vec{x},t)$ - значения импульса и момента импульса молекул в сопровождающей жидкость системе координат, а $\vec{u}(\vec{x},t)$ и $\vec{\omega}(\vec{x},t)$ - макроскопические скорости поступательного и вращательного движения жидкости, $\delta(\vec{x})$ -дельта функции Дирака.

Изменение неравновесного состояния жидкой системы описывается уравнениями изменения плотностей динамических параметров состояния во времени. Однако полученная таким образом система уравнений будет не замкнутой. В уравнения изменения одних динамических величин входят другие динамические величины. Например, в уравнение изменения динамической плотности числа частиц $\hat{n}(\vec{x},\vec{\theta})$ входят динамические плотности векторов потоков числа частиц - $\hat{\vec{J}}_t(\vec{x},\vec{\theta})$ и $\hat{\vec{J}}_r(\vec{x},\vec{\theta})$, а в уравнения изменения этих векторов во времени входят компоненты динамической плотности тензоров переноса импульса и момента импульса

$$\hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\breve{P}_i^{\alpha}\breve{P}_i^{\beta}}{m} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j=i}^{N} F_{ij}^{\alpha} X_{ij}^{\beta} \right)\delta(\vec{x}_i-\vec{x})\delta(\vec{\theta}_i-\vec{\theta}), \tag{6a}$$

$$\hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\breve{M}_i^{\alpha}\breve{M}_i^{\gamma}}{I_{\beta\gamma}} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j=i}^{N} N_{ij}^{1\alpha} b_i^{\beta\gamma}\theta_{ij}^{\gamma}\right)\delta(\vec{x}_i-\vec{x})\delta(\vec{\theta}_i-\vec{\theta}), \tag{6б}$$

$$\hat{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}_i\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N}\frac{\breve{P}_i^{\alpha}\breve{M}_i^{\gamma}}{I_{\beta\gamma}}\delta(\vec{x}_i-\vec{x})\delta(\vec{\theta}_i-\vec{\theta}), \quad \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x}_i\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^{N}\frac{\breve{M}_i^{\alpha}\breve{P}_i^{\beta}}{m}\delta(\vec{x}_i-\vec{x})\delta(\vec{\theta}_i-\vec{\theta}). \tag{6в}$$

Здесь

$$\hat{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta}) = \frac{m}{I_{\beta\gamma}}\cdot \hat{P}_{rt}^{\alpha\gamma}(\vec{x},\vec{\theta}).$$

Так как изменения компонент тензоров $\hat{P}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})$ по времени являются определяющими в описании вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей, их уравнения изменения по времени приведем в полном виде

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})}{\partial t} + m\hat{J}_t^{\alpha}(\vec{x},\vec{\theta})\frac{du^{\beta}(\vec{x},t)}{dt} + m\hat{J}_t^{\beta}(\vec{x}_i,\vec{\theta})\frac{du^{\alpha}(\vec{x},t)}{dt} + \frac{\partial \hat{S}_t^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x},\vec{\theta})}{\partial x^{\gamma}} + \\
&+\frac{\partial}{\partial x^{\gamma}}\left(u^{\gamma}(\vec{x},t)\hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\right) + \frac{\partial}{\partial \theta^{\gamma}}\left(a^{\gamma\sigma}\hat{S}_t^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x},\vec{\theta})\right) + \frac{\partial}{\partial \theta^{\gamma}}\left(a^{\gamma\sigma}\omega^{\sigma}(\vec{x},t)\hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\right) + \\
&+\hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\frac{\partial u^{\beta}(\vec{x},t)}{\partial x^{\gamma}} + \hat{P}_t^{\alpha\gamma}(\vec{x},\vec{\theta})\frac{\partial u^{\beta}(\vec{x},t)}{\partial x^{\gamma}} = \hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})
\end{aligned} \tag{7а}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})}{\partial t} + I_{\beta\lambda}\hat{J}_r^{\lambda}(\vec{x}_i,\vec{\theta})\frac{du^{\beta}(\vec{x},t)}{dt} + I_{\beta\lambda}\hat{J}_t^{\beta}(\vec{x}_i,\vec{\theta})\frac{d\omega^{\lambda}(\vec{x},t)}{dt} + \frac{\partial \hat{R}_t^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x},\vec{\theta})}{\partial x^{\gamma}} + \\
&+\frac{\partial}{\partial x^{\gamma}}\left(u^{\gamma}(\vec{x},t)\hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\right) + \frac{\partial}{\partial \theta^{\gamma}}\left(a^{\gamma\sigma}\hat{R}_t^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x},\vec{\theta})\right) + \frac{\partial}{\partial \theta^{\gamma}}\left(a^{\gamma\sigma}\omega^{\sigma}(\vec{x},t)\hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\right) + \\
&+\hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})I_{\beta\lambda}\frac{\partial \omega^{\lambda}(\vec{x},t)}{\partial X^{\gamma}} + \hat{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\frac{\partial u^{\alpha}(\vec{x},t)}{\partial X^{\gamma}} = \hat{I}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})
\end{aligned} \tag{7б}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})}{\partial t} + I_{\gamma\beta}\hat{J}_r^{\gamma}(\vec{x},\vec{\theta})\frac{d\omega^{\alpha}(\vec{x},t)}{dt} + \hat{J}_r^{\alpha}(\vec{x},\vec{\theta})I_{\gamma\beta}\frac{d\omega^{\gamma}(\vec{x},t)}{dt} + \frac{\partial \hat{\pi}_t^{\alpha\beta\gamma}(\vec{x},\vec{\theta})}{\partial x^{\gamma}} + \\
&+\frac{\partial}{\partial x^{\gamma}}(u^{\gamma}(\vec{x},t)\hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})) + \frac{\partial}{\partial \theta^{\gamma}}(a^{\alpha\varsigma}\pi_r^{\alpha\beta\sigma}(\vec{x},\vec{\theta})) + \frac{\partial}{\partial \theta^{\gamma}}(a^{\gamma\sigma}\omega^{\sigma}(\vec{x},t)\hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})) + \\
&+\hat{P}_{tr}^{\beta\gamma}(\vec{x},\vec{\theta})\frac{\partial \omega^{\alpha}(\vec{x},t)}{\partial x^{\gamma}} + \hat{P}_{rt}^{\alpha\gamma}\frac{I_{\beta\sigma}}{m}\frac{\partial \omega^{\sigma}(\vec{x},t)}{\partial x^{\gamma}} = \hat{I}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta}).
\end{aligned} \tag{7в}$$

где

$$\hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta}) \approx \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{N}\sum_{i\neq j=1}^{N}\left(F_{ij}^{\alpha}P_{ij}^{\beta} + F_{ij}^{\beta}P_{ij}^{\alpha}\right)\delta(\vec{x}_i,-\vec{x})\delta(\vec{\theta}_i-\vec{\theta})$$

$$\hat{I}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta}) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{i\neq j=1}^{N}\left(\frac{F_{ij}^{\alpha}M_{ij}^{\beta}}{m} + \frac{N_{ij}^{\beta}P_{ij}^{\alpha}}{m}\right)\delta(\vec{x}_i,-\vec{x})\delta(\vec{\theta}_i-\vec{\theta}), \tag{8}$$

$$\hat{I}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta}) \approx \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{i\neq j=1}^{N} I_{\alpha\lambda}^{-1}\left(N_{ij}^{\lambda}M_{ij}^{\beta} + M_{ij}^{\lambda}N_{ij}^{\beta}\right)\delta(\vec{x}_i,-\vec{x})\delta(\vec{\theta}_i-\vec{\theta})$$

- соответствующие источники.

Чтобы замкнуть систему уравнений (7) воспользуемся известным приближением

$$\hat{S}^{\alpha\beta\gamma} \approx \frac{1}{2}(\hat{S}^{\alpha}\,\delta_{\beta\gamma} + \hat{S}^{\beta}\,\delta_{\alpha\gamma} + \hat{S}^{\gamma}\,\delta_{\alpha\beta}), \tag{9}$$

где $\hat{S}^{\alpha}$ - локальная динамическая плотность компонент вектора потока тепла. Молекулярные выражения всех потоков приведены в диссертации.

В третьем параграфе этой главы, в линейном приближении по отклонениям термодинамических параметров системы от их равновесного значения, получено выражение для локально-равновесной функции распределения. С учетом членов, существенных только для изучения вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей, это выражение можно записать в виде

$$f_L = f_0\left\{1 - \iint d\vec{x}' d\vec{\theta}' \left[\cdots - \xi_t^{\alpha\beta}(\vec{x}',t)\bar{P}_t^{\alpha\beta}(t) - \xi_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x}',t)\bar{P}_{tr}^{\alpha\beta}(t) - \xi_r^{\alpha\beta}(\vec{x}',t)\bar{P}_r^{\alpha\beta}(t) - \cdots\right]\right\}, \tag{10}$$

где
$$f_0 = \frac{\exp\{-\beta(\vec{x},t)(\breve{H} - \mu(\vec{x},t)N)\}}{\int\ldots\int \exp\{-\beta(\vec{x},t)(\breve{H} - \mu(\vec{x},t)N)\}d\Gamma} \tag{11}$$
- функция локально-равновесного канонического распределения Гиббса. С использованием (6) и (13) были определены значения неизвестных макроскопических параметров $\xi^{\alpha\beta}(\vec{x},t)$

$$\xi_t^{\alpha\beta}(\vec{x},t) = \frac{\langle \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\hat{P}_r^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta})\rangle_0}{\Delta}\bar{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t) - \frac{\langle \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\hat{P}_r^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta})\rangle_0}{\Delta}\bar{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t), \tag{12а}$$

$$\xi_r^{\alpha\beta}(\vec{x},t) = \frac{\langle \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\hat{P}_t^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta})\rangle_0}{\Delta}\bar{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t) - \frac{\langle \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\hat{P}_t^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta})\rangle_0}{\Delta}\bar{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t), \tag{12б}$$

$$\xi_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},t) = \frac{\bar{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t)}{\langle \hat{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\hat{P}_{tr}^{\gamma\sigma}(t)\rangle_0}, \tag{12в}$$

$$\Delta = \langle \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\tilde{P}_t^{\gamma\sigma}(t)\rangle_0 \langle \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\tilde{P}_r^{\gamma\sigma}(t)\rangle_0 - \langle \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\tilde{P}_r^{\gamma\sigma}(t)\rangle_0 \langle \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\tilde{P}_r^{\gamma\sigma}(t)\rangle_0. \tag{12г}$$

В четвертом параграфе этой главы на основе выражения (3), (5) и (12) в членах, необходимых для описания вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей, для НФР найдено выражение

$$f(t) = f_L + f_t \approx f_L + f_0\Delta f\,, \tag{13}$$

$$\Delta f = -\int_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t_1} dt_1 [\cdots + A_t^{\alpha\beta}(\vec{x},t+t_1)\tilde{P}_t^{\alpha\beta}(t_1) + A_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},t+t_1)\tilde{P}_{tr}^{\alpha\beta}(t_1) + A_r^{\alpha\beta}(\vec{x},t+t_1)\tilde{P}_r^{\alpha\beta}(t_1) +$$
$$+\xi_t^{\alpha\beta}(\vec{x},t+t_1)\tilde{I}_t^{\alpha\beta}(t_1) + \xi_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},t+t_1)\tilde{I}_{tr}^{\alpha\beta}(t_1) + \xi_r^{\alpha\beta}(\vec{x},t+t_1)\tilde{I}_r^{\alpha\beta}(t_1) + \cdots].$$

Заметим, что вторая - неравновесная часть (13) позволяет определить неравновесные значения источников (8) и преобразовать систему уравнения

(7) в уравнения обобщенной (релаксационной) гидродинамики.

В третьей главе усреднением (7) по неравновесному статистическому ансамблю (13), получена замкнутая система уравнений обобщенной гидродинамики асимметричных жидкостей, позволяющая исследовать динамические вязкоупругие свойства асимметричных жидкостей.

В первом параграфе этой главы усреднением по НФР (13) для релаксационных источников (8) системы уравнений (7) получены следующие выражения

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\rangle_t &= \chi_{tt}^{\alpha\beta\gamma\sigma}\overline{P}_t^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta},t)+\chi_{tr}^{\alpha\beta\gamma\sigma}\overline{P}_r^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta},t)+\chi_{t\,tr}^{\alpha\beta\gamma\sigma}\overline{P}_{tr}^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta},t),\\
\langle \hat{I}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\rangle_t &= \chi_{rr}^{\alpha\beta\gamma\sigma}\overline{P}_r^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta},t)+\chi_{rt}^{\alpha\beta\gamma\sigma}\overline{P}_t^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta},t)+\chi_{r\,tr}^{\alpha\beta\gamma\sigma}\overline{P}_{tr}^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta},t),\\
\langle \hat{I}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\rangle_t &= \chi_{tr}^{\alpha\beta\gamma\sigma}\overline{P}_{tr}^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta},t)+\chi_{tr}^{\alpha\beta\gamma\sigma}\overline{P}_t^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta},t)+\chi_{tr\,r}^{\alpha\beta\gamma\sigma}\overline{P}_r^{\gamma\sigma}(\vec{x},\vec{\theta},t).
\end{aligned}
\tag{14}
$$

Здесь, тензорные коэффициенты $\chi^{\alpha\beta\gamma\sigma}$, обратные значения которых представляются как характерные времена релаксации, имеют очень сложный вид. Например, выражения для двух тензорных коэффициентов, упрощённые варианты которых в дальнейшем будет использован для проведения численных расчетов, в исходном варианте имеют вид:

$$
\chi_{tt}^{\alpha\beta\gamma\sigma}=(\tau_{tt}^{\alpha\beta\gamma\sigma})^{-1}=\frac{\langle \hat{P}_r^{\lambda\gamma}(\vec{X},\vec{\theta})\tilde{P}_r^{\rho\sigma}(t)\rangle_0\int_{-\infty}^{0}\langle \hat{I}_t^{\alpha\beta}(\vec{X},\vec{\theta})\hat{I}_t^{\lambda\rho}(t_1)\rangle_0 dt_1}{\Delta};
$$

$$
\chi_{rr}^{\alpha\beta\gamma\sigma}=(\tau_{rr}^{\alpha\beta\gamma\sigma})^{-1}=\frac{\langle \hat{P}_t^{\lambda\gamma}(\vec{X},\vec{\theta})\tilde{P}_t^{\rho\sigma}(t)\rangle_0\int_{-\infty}^{0}\langle \hat{I}_r^{\alpha\beta}(\vec{X},\vec{\theta})\hat{I}_r^{\lambda\rho}(t_1)\rangle_0 dt_1}{\Delta}; \tag{15}
$$

$$
\Delta=\langle \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\widetilde{P}_t^{\rho\lambda}(t)\rangle_0\langle \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\widetilde{P}_r^{\rho\lambda}(t)\rangle_0-\langle \hat{P}_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\widetilde{P}_r^{\rho\lambda}(t)\rangle_0\langle \hat{P}_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta})\widetilde{P}_t^{\rho\lambda}(t)\rangle_0.
$$

Очевидно, что время релаксации должно быть скалярной величиной.

Предполагая, что корреляция между компонентами тензоров $P^{\alpha\beta}$, обусловленных одинаковыми степенями свободы молекул жидкости, гораздо больше, чем корреляция между компонентами тензоров $P^{\alpha\beta}$, обусловленных различными степенями свободы молекул жидкости, пренебрегая вкладом релаксации несовпадающих компонент этого и других тензоров на временное изменение данной компоненты исследуемого тензора (положив $\alpha=\lambda$, $\beta=\sigma$), приведем характерные времена релаксации к скалярному виду. Тогда, переходя в (7) к компонентам тензоров вязких напряжений $\sigma^{\alpha\beta}$

$$\begin{aligned} &\sigma_{tt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t) = -\bar{P}_{tt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t) = -P_{tt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t) + P_t\,(\vec{x},\vec{\theta},t)\delta^{\alpha\beta}, \\ &\sigma_{rr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t) = -\bar{P}_{rr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t) = -P_{rr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t) + P_r\,(\vec{x},\vec{\theta},t)\delta^{\alpha\beta}, \\ &\sigma_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t) = -\bar{P}_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t) = -(m/I)\,\bar{P}_{rt}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t). \end{aligned} \tag{16}$$

с учетом вышесказанного и пренебрежением вкладов диффузионных, термоупругих процессов в вязкоупругие свойства жидкости, получим замкнутую систему уравнений обобщенной гидродинамики для компонент тензора вязкого напряжения в виде:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial\sigma_t^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t)}{\partial t} - \tau_{tt}^{-1}\sigma_t^{\rho\lambda}(\vec{x},\vec{\theta},t) - \tau_{tr}^{-1}\sigma_r^{\rho\lambda}(\vec{x},\vec{\theta},t) - \tau_{t\,tr}^{-1}\sigma_{tr}^{\rho\lambda}(\vec{x},\vec{\theta},t) = \\ &= -P_t\left\{\frac{\partial u^\alpha(\vec{x},t)}{\partial x^\beta}\right\} - \frac{5}{2}P_t\delta^{\alpha\beta}\mathrm{div}\vec{u}(\vec{x},t) - P_t\delta^{\alpha\beta}\frac{\partial}{\partial\theta^\gamma}\left(a^{\gamma\sigma}\omega^\alpha(\vec{x},t)\right) - \frac{\partial P_t(\vec{x},\vec{\theta},t)}{\partial t}\delta^{\alpha\beta}; \end{aligned} \tag{17а}$$

$$\frac{\partial\sigma_{tr}^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t)}{\partial t} - \tau_{tr\,t}^{-1}\sigma_t^{\rho\lambda}(\vec{x},\vec{\theta},t) - \tau_{tr\,r}^{-1}\sigma_r^{\rho\lambda}(\vec{x},\vec{\theta},t) - \tau_{tr\,tr}^{-1}\sigma_{tr}^{\rho\lambda}(\vec{x},\vec{\theta},t) = 0; \tag{17б}$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial\sigma_r^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},t)}{\partial t} - \tau_{rt}^{-1}\sigma_t^{\rho\lambda}(\vec{x},\vec{\theta},t) - \tau_{rr}^{-1}\sigma_r^{\rho\lambda}(\vec{x},\vec{\theta},t) - \tau_{r\,tr}^{-1}\sigma_{tr}^{\rho\lambda}(\vec{x},\vec{\theta},t) = \\ &= -P_r\delta^{\alpha\beta}\mathrm{div}\vec{u}(\vec{x},t) - P_r\delta^{\alpha\beta}\frac{\partial}{\partial\theta^\gamma}\left(a^{\gamma\sigma}\omega^\sigma(\vec{x},t)\right) - \frac{\partial P_r(\vec{x},\vec{\theta},t)}{\partial t}\delta^{\alpha\beta}. \end{aligned} \tag{17в}$$

Представив производные давления как $\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right) = \frac{1}{C_V}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_n\left(\frac{\partial E}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial P}{\partial n}\right)_T\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)$, используя уравнения законов сохранения числа частиц и внутренней энергии жидкости, выразим производные $\left(\frac{\partial E}{\partial t}\right)$, $\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)$ через соответствующие градиенты макроскопических скоростей движения жидкости. Решая затем систему уравнений (17) относительно Фурье-образов компонент тензоров $\sigma^{\alpha\beta}(\vec{x},\vec{\theta},\nu)$, получим 9 отличных от нуля значений обобщенных коэффициентов вязкостей - $\eta_{S\,tt}(i\nu)$, $\eta_{S\,rt}(i\nu)$, $\eta_{S\,tr\,t}(i\nu)$, $\eta_{V\,rt}(i\nu)$, $\eta_{V\,rt}(i\nu)$, $\eta_{V\,tr\,t}(i\nu)$, $\eta_{V\,tr}^{в}(i\nu)$, $\eta_{V\,rr}^{в}(i\nu)$, $\eta_{V\,tr\,r}^{в}(i\nu)$. Эти обобщенные коэффициенты вязкостей являются сложными функциями частоты ν и характерных времен релаксации τ. Например, выражение для обобщенного коэффициента сдвиговой вязкости, обусловленного поступательными степенями свободы молекул, имеет вид

$$
\eta_{S\,tt}(i\nu)=P_t\frac{\left[(1+i\nu\tau_{rr})(1+i\nu\tau_{tr\,tr})-\left(\frac{\tau_{rr}\tau_{tr\,tr}}{\tau_{r\,tr}\tau_{t\,tr}}\right)\right]\tau_{tt}\left[1-\frac{1}{C_V}\left(\frac{\partial P_t(n,T)}{\partial T}\right)_n\right]-\frac{1}{C_V}\left(\frac{\partial P_r(n,T)}{\partial T}\right)_n\left[(1+i\nu\tau_{tr\,tr})\left(\frac{\tau_{tt}}{\tau_{tr}}\right)-\left(\frac{\tau_{tt}\tau_{tr\,tr}}{\tau_{t\,tr}\tau_{tr\,r}}\right)\right]\tau_{rr}}{(1+i\nu\tau_{tt})(1+i\nu\tau_{rr})(1+i\nu\tau_{tr\,tr})-(1+i\nu\tau_{tt})\left(\frac{\tau_{rr}\tau_{tr\,tr}}{\tau_{r\,tr}\tau_{tr\,r}}\right)-(1+i\nu\tau_{rr})\left(\frac{\tau_{tt}\tau_{tr\,tr}}{\tau_{t\,tr}\tau_{r\,tr}}\right)-(1+i\nu\tau_{tr\,tr})\left(\frac{\tau_{rr}\tau_{tt}}{\tau_{rt}\tau_{tr}}\right)-\left(\frac{\tau_{tt}\tau_{rr}\tau_{tr\,tr}}{\tau_{rt}\tau_{r\,tr}\tau_{tr\,r}}\right)-\left(\frac{\tau_{tt}\tau_{rr}\tau_{tr\,tr}}{\tau_{tr\,t}\tau_{r\,tr}\tau_{tr}}\right)}\,. \quad (18)
$$

Определяя реальные и мнимые части соответствующих обобщенных коэффициентов вязкостей согласно $\eta(i\nu)=\eta(\nu)-i\frac{1}{\nu}\mu(\nu)$, можно получить аналитические выражения для динамических коэффициентов вязкостей $\eta(\nu)$ и соответствующих им динамических модулей упругостей $\mu(\nu)$.

Однако определение реальных и мнимых частей выражения типа (18) выполнимая, но сложная задача. Поэтому в третьем параграфе этой главы, с учетом особенностей молекулярной структуры конкретных моделей жидкости, выражения типа (18) упрощаются. В частности, для жидких систем, где обмен энергией между одинаковыми степенями свободы молекул происходит быстрее, чем обмен энергия между различными степенями свободы, т.е. когда $\frac{\tau_{tt}}{\tau_{tr}}, \frac{\tau_{rr}}{\tau_{rt}}, \frac{\tau_{tr\,tr}}{\tau_{tr\,t}}, \frac{\tau_{tt}\tau_{rr}}{\tau_{t\,tr}\tau_{r\,tr}}, \frac{\tau_{tt}\tau_{rr}\tau_{tr\,tr}}{\tau_{t\,tr}\tau_{r\,tr}\tau_{tr}} \ll 1$, получим 5 отличных от нуля значений динамических коэффициентов вязкостей и динамических модулей упругости:

$$
\eta_{S\,tt}(\nu)=\eta^{в}_{V\,tr}(\nu)=\frac{\mu^{\infty}_{stt}\tau_{tt}}{1+(\nu\tau_{tt})^2};\quad \eta_{V\,tt}(\nu)=\frac{5}{2}\frac{\mu^{\infty}_{V\,tt}\tau_{tt}}{1+(\nu\tau_{tt})^2};\quad \eta_{V\,rt}(\nu)=\eta^{в}_{V\,rr}(\nu)=\frac{\mu^{\infty}_{V\,rr}\tau_{rr}}{1+(\nu\tau_{rr})^2}; \quad (19)
$$

$$
\mu_{S\,tt}(\nu)=\mu^{в}_{V\,tr}(\nu)=\frac{\mu^{\infty}_{stt}(\nu\tau_{tt})^2}{1+(\nu\tau_{tt})^2};\quad \mu_{V\,tt}(\nu)=\frac{5}{2}\frac{\mu^{\infty}_{V\,tt}(\nu\tau_{tt})^2}{1+(\nu\tau_{tt})^2};\quad \mu_{V\,rt}(\nu)=\mu^{в}_{V\,rr}(\nu)=\frac{\mu^{\infty}_{V\,rr}(\nu\tau_{rr})^2}{1+(\nu\tau_{rr})^2}, \quad (20)
$$

где
$$
\mu^{\infty}_{V\,tt}=P_t\left[1-\frac{1}{C_V}\left(\frac{\partial P_t(n,T)}{\partial T}\right)_n\right]-\frac{E}{C_V}\left(\frac{\partial P_t(n,T)}{\partial T}\right)_n-n\left(\frac{\partial P_t(n,T)}{\partial n}\right)_T,
$$

$$
\mu^{\infty}_{stt}=P_t\left[1-\frac{1}{C_V}\left(\frac{\partial P_t(n,T)}{\partial T}\right)_n\right],\quad \mu^{\infty}_{V\,rr}=P_r\left[1-\frac{1}{C_V}\left(\frac{\partial P_r(n,T)}{\partial T}\right)_n\right]-\frac{E}{C_V}\left(\frac{\partial P_r(n,T)}{\partial T}\right)_n-n\left(\frac{\partial P_r(n,T)}{\partial n}\right)_T.
$$

Видно, что в данном приближении трансляционные и вращательные релаксационные процессы, происходят независимо друг от друга и их вклады в динамические вязкоупругие свойства жидкости разделены.

Из выражений (19) и (20) также вытекает, что вязкоупругие свойства жидкостей в областях низких частот ($\nu\to 0$) определяются низкочастотными значениями коэффициентов вязкостей - $\eta_{S\,tt}(0)=\mu^{\infty}_{stt}\tau_{tt}$, $\eta_{V\,tt}(0)=\frac{5}{2}\mu^{\infty}_{V\,tt}\tau_{tt}$,

$\eta^{в}_{V\,tr}(0) = \mu^{\infty}_{stt}\tau_{tt}$, $\eta_{V\,rt}(0) = \mu^{\infty}_{V\,rr}\tau$, а в высокочастотных областях $(\nu \to \infty)$ высокочастотными значениями модулей упругости - $\mu_{V\,tt}(\infty) = \frac{5}{2}\mu^{\infty}_{Vtt}$, $\mu^{в}_{V\,tr}(\infty) = \mu^{\infty}_{stt}$, $\mu^{в}_{V\,tr}(\infty) = \mu^{\infty}_{stt}$, $\mu^{в}_{V\,tr}(\infty) = \mu^{\infty}_{stt}$, $\mu^{в}_{V\,rr}(\infty) = \mu^{\infty}_{Vrr}$.

Исследования показали, что в определении динамических свойств жидкости определяющую роль играет тот релаксационный процесс, который имеет наименьшее значение характерного времени.

Четвертая глава посвящена проведению численного расчета и определению закономерностей зависимости динамических вязкоупругих параметров простых моделей асимметричных жидкостей (жидкого аргона и простых моделей нематических жидких кристаллов - ПАА).

В первом параграфе этой главы, рассмотрены простые жидкие системы, где определяющую роль играют трансляционные релаксационные процессы с характерным временем релаксации

$$\tau_{tt} = 5m/6\beta_{tt}; \quad \beta_{tt} = (3nkT)^{-1}\int_0^{\infty}\left\langle F(\vec{x},\vec{\theta})F(t)\right\rangle_0 dt. \tag{21}$$

Основная задача при проведении численных расчетов сводится к задаче определение значения равновесного коррелятора сила-сила - $\left\langle F(\vec{x},\vec{\theta})F(t)\right\rangle_0$. Использованием значения молекулярных параметров жидкого аргона $\sigma \approx 3{,}405\cdot 10^{-10}$ *м;* $m \approx 66{,}341\cdot 10^{-27}$ *кг;* $\varepsilon = 1{,}653\cdot 10^{-21}$ *Дж,* была проведена численные расчеты значения β_{tt} и τ_{tt} с использованием функции канонического распределения Гиббса, и с использованием приведенного в [2,3] для β_{tt} выражение. Однако, большая часть расчетов было проведено с использованием полученного нами для β_{tt} с учетом радиальной структуры жидкос-жидкостей, выражение

$$\beta_{tt} = B_1 \frac{\overset{*}{n}}{\overset{*}{T}}\int_0^{\infty}(\overset{*}{\Phi}'(r))^2 g_0(r) r^2 dr \qquad B_1 = \frac{4\varepsilon\tau_c}{3\sigma^2}. \tag{22}$$

Здесь, $r = \frac{x_{ij}}{\sigma}$, $\overset{*}{T} = \frac{kT}{\varepsilon}$, $\overset{*}{n} = n\cdot\frac{1}{6}\pi\sigma^3$ и $\overset{*}{\Phi}_{12} = \frac{\Phi_{12}}{\varepsilon}$ являются соответствующими безразмерными величинами.

В качестве расчетного потенциала парного межмолекулярного взаимодействия использовали: - модельный потенциал Леннарда - Джонса

$$\overset{*}{\Phi}_{ij}(r) = \begin{cases} \infty, & \text{если} \quad r \le 1; \\ 4\left(\dfrac{1}{r^{12}} - \dfrac{1}{r^{6}}\right), & \text{если} \quad 1 < r < \infty \end{cases} \tag{23}$$

- и равновесную радиальную функцию распределения типа

$$g_0(r) = \begin{cases} y(1), & r \le 1; \\ e^{\frac{\Phi^*(r)}{T^*}} y(r), & 1 < r < 2; \\ e^{\frac{\Phi^*(r)}{T^*}}, & r \ge 2, \end{cases} \tag{24}$$

где $y(r)$ - бинарная функция распределения двух полостей, выражение для которых приведено в диссертации.

Во втором параграфе четвертой главы приведены результаты численного расчета зависимостей вязкоупругих параметров жидкого аргона от температуры, плотности, давления и частоты. На рис. 1. приставлено численные расчеты температурных зависимостей коэффициента внутреннего трения β_{tt} и характерного времени трансляционной релаксации τ_{tt} жидкого аргона для трех значений плотности. Уменьшение значения коэффициента

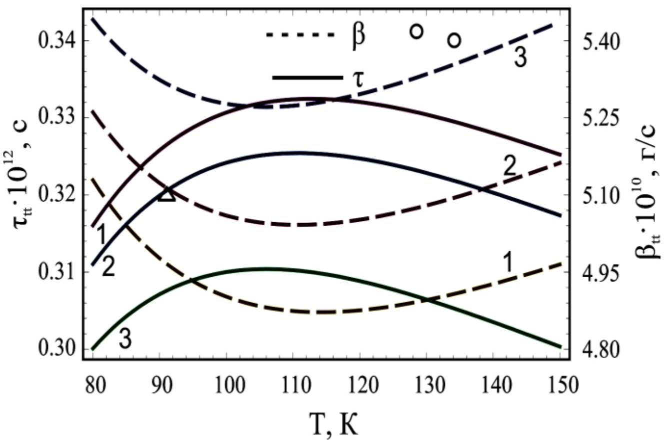

Рис. 1. Температурная зависимость коэффициента внутреннего трения (пунктиры) и времени трансляционной релаксации (сплошные) жидкого аргона при разных плотностях: 1-1387кг/м^3; 2-1400кг/м^3; 3 -1429 кг/м^3.

внутреннего трения (вязкости) жидкостей с ростом темперы соответствует существующим литературным данным. Это падение объясняется тем, что трение в жидкостях обусловлено, главным образом, взаимодействием молекул. С ростом температуры объем жидкости возрастает, соответственно этому растёт взаимное расстояние между молекулами, ослабляется межмолекулярное взаимодействие, т.е. падает сила внутреннего трения. Однако в случае фиксированных плотностей жидкость не может расширяться и усиление «столкновений» молекул с ростом температуры может способствовать увеличению внутреннего трения (как в случае газового состояния).

Чтобы проверить справедливость первого механизма, в конечных упрощенных формулах для расчета перешли от переменных (ρ,T) к переменным (P,T).

Результаты расчета $\beta_{tt}(T)$ и $\tau_{tt}(T)$ при двух фиксированных значения давления приведены на рис.2. Как видно из рисунка, изобары $\beta_{tt}(T)$ с ростом температуры уменьшается и такое поведение лучше проявляется при более высоких значениях плотности. Это в некоторой степени дает основание

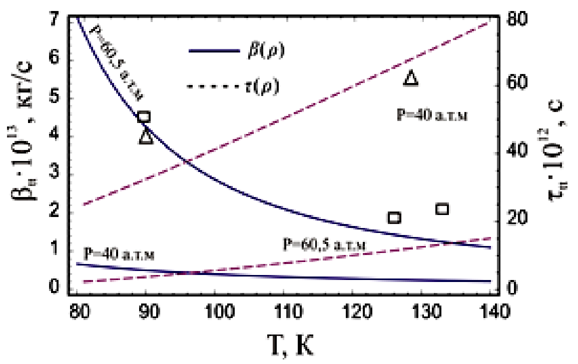

Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента внутреннего трения (сплошные) и времени трансляционной релаксации (пунктиры) жидкого аргона при давлениях 40 и 60,5 атм.

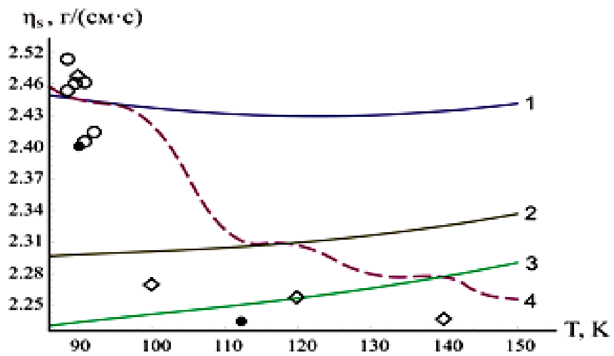

Рис. 3. Температурная зависимость низкочастотного значения коэффициента сдвиговой вязкости жидкого аргона при плотностях:1-1429 кг/м^3; 2-1400 кг/м^3; 3-1387 кг/м^3 и 4-для экспериментально- согласованных значений ρ, P, T.

утверждать, что наши уравнения относительно хорошо описывают вязкоупругие свойства жидкостей при высоких давлениях. Увеличение значения $\tau_{tt}(T)$ с ростом температуры указывает на термический (обменный) характер трансляционных релаксационных процессов.

На основе этих результатов были рассчитаны температурные зависимости низкочастотного значения коэффициента сдвиговой вязкости жидкого аргона при трех значениях плотности (1-1429 кг/м^3; 2-1400 кг/м^3; 3-1387 кг/м^3) и для экспериментально-согласованных значений ρ, P, T (пунктирная кривая 4), которые приведены на рис. 3. Как видно, при фиксированных значениях плотности имеет место небольшое увеличение, а при взаимно-согласованных значениях ρ, P, T уменьшение $\eta_S(T)$ с ростом температуры, что вполне согласуется с выше приведенными суждениями и качественно совпадает с существующими экспериментальными данными (○, ◊).

На рис. 4. представлены результаты расчета зависимостей динамического коэффициента сдвиговой вязкости $\eta_{Stt}(\nu)$ и динамического модуля сдвиговой упругости $\mu_{Stt}(\nu)$ от частоты (ν) по формулам (19) и (20). Из хода кривых $\eta_S(\nu)$ и $\mu_S(\nu)$ видно, что в низкочастотной области динамических процессов вязкоупругие свойства простых жидкостей определяются, в основном, низкочастотным значением динамической вязкости жидкости, а в высокочастотной- высокочастотным значением динамического модуля упругости $\mu_S(\nu \to \infty)$.

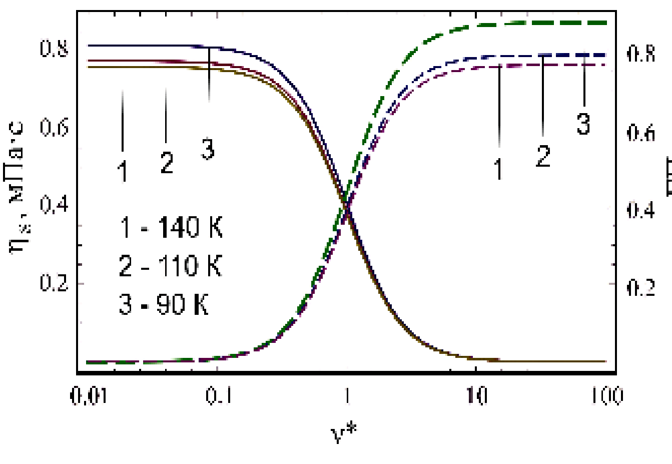

Рис.4. Частотные зависимости динамического коэффициента сдвиговой вязкости (сплошные) и динамического модуля сдвиговой упругости (пунктиры) при температуре:1- 140К; 2- 110К; 3-90К.

В третьем параграфе приведены аналогичные численные расчеты зависимостей вязкоупругих параметров простых моделей нематических жидких кристаллов (НЖК) от температуры, плотности и частоты. Предполагается, что жидкие системы, где определяющую роль играют вращательные релаксационные процессы, состоят из жестких стержнеобразных молекул.

Основным параметром, учитывающим особенности структуры и характер релаксационных процессов в рассматриваемой модели жидкости, является характерное время вращательной релаксации

$$\tau_{rr} = \frac{5I_{\alpha\alpha}}{6\beta_{rr}}, \quad \beta_r = \frac{1}{3nkTN}\int_0^\infty dt\langle \hat{N}_r(\vec{x},\vec{\theta})\tilde{N}_r(t)\rangle_0 , \tag{25}$$

Задача исследования вязкоупругих свойств НЖК здесь, также сводится к задаче определения равновесного коррелятора момент силы-момент силы $\langle \hat{N}_r(\vec{x},\vec{\theta})\tilde{N}_r(t)\rangle_0$. Выбираем потенциальную энергию парного взаимодействия и радиальную функцию распределения молекул в виде

$$\phi_{ij}(\vec{x}_{ij},\vec{\theta}_{ij}) = \phi_{ij}(\vec{x}_{ij}) + \phi_{ij}(\vec{\theta}_{ij}), \qquad g_0(x_{ij},\theta_i) = g_0(x_{ij})e^{-\frac{\phi(\theta_{ij})}{kT}} , \tag{26}$$

где $\phi_{ij}(\vec{x}_{ij})$ и $g_0(x_{ij})$ определяются по формулам (23) и (24). Используя в качестве потенциала ориентационного взаимодействия потенциалы Майера - Заупе и Мак Милана

$$\phi_{ij}(\theta_{ij}) = -\frac{A}{V_m^2}\eta\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta_i - \frac{1}{2}\right), \quad \phi\,(r_{ij,}\theta_{ij}) = \frac{V_0 e^{\left(r_{ij}/r_0\right)^2}}{N r_o^3 \pi^{3/2}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta_{ij} - \frac{1}{2}\right). \tag{27}$$

для НЖК п-азоксианизола (ПАА) при значении параметров $A/V_m^2 = 4.5413kT_{NI}$, η=η_{NI}=0.36. $T_{NI} = 408.85\ K$ $m = 42,86\cdot 10^{-23}$ г; $L \approx 20A^o$; $d \approx 5A^o$; $T_{NI} = 408,3K^o$. получили следующие выражения для β_{rr}: а) по потенциалу Майера-Заупе

$$\beta_{rr} = \tilde{\tau}_в 9,63\cdot 10^{-34}\frac{n^*}{T^*}\int_0^\infty g_0(r)r^2 dr e^{\frac{1,135}{T^*}}\int_0^\pi e^{-\frac{3,405}{T^*}\cos^2\theta_i}\cos^2\theta_i \sin^3\theta_i d\theta_i, \ \frac{кг\cdot м^2}{c} \quad ; \tag{28}$$

б) по потенциалу Мак Миллана

$$\beta_{rr} = \tilde{\tau}_в \cdot 10,9\cdot 10^{-33}\frac{n^*}{T^*}\int_0^\infty g_0(r)r^2 dr e^{-\left(r/4\right)^2}\int_0^\pi e^{-\frac{1,35}{T^*}\left(1-\frac{1}{4}\left(\frac{R}{4}\right)^4\right)(3\cos^2\theta_{ij}-1)}\cos^2\theta_{ij}\sin^3\theta_i d\theta_i, \ \frac{кг\cdot м^2}{c}. \tag{29}$$

Молекулы НЖК представлялись как тонкие стержни длиной L и диаметра d с моментами инерции $I_{zz} = \frac{1}{8}m_0\sigma^2$, $I_{XX} = I_{YY} = \frac{1}{12}m_0 L^2$. Следовательно, для каждого значения коэффициента внутреннего трения β_{rr} имеем два значения характерного времени вращательной релаксации τ_{rr} - $\tau_{rr}^{\parallel} = \frac{I_{zz}}{\beta_{rr}}$ и $\tau_{rr}^{\perp} = \frac{I_{xx}}{\beta_{rr}}$.

Результаты численного расчета $\beta_{rr}(\rho)$ и $\tau_{rr}(\rho)$ при фиксированиях значениях температуры с использованием обоих потенциалов показали (рис.5) почти линейный рост, что не противоречит свойствам жидкостей. Сложнее обстоит дело с температурными зависимостями при фиксированных плотностях по потенциалу Майера-Заупе (рис.5а) и потенциалу Мак-Милана (рис. 5б).

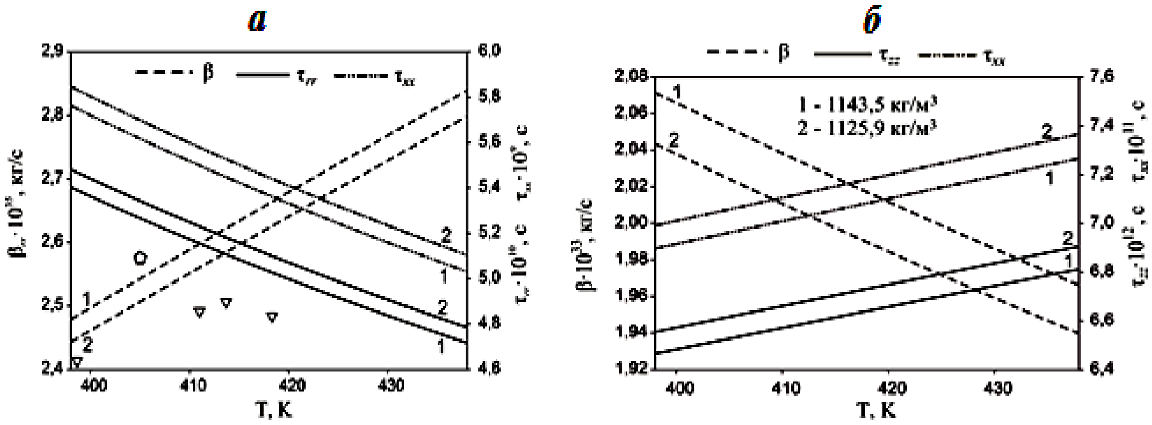

Рис. 5. Температурные зависимости $\beta_{rr}(\rho)$ и $\tau_{rr}(\rho)$ по потенциалам: *а*- Майера-Заупе; *б*- Мак-Милана.

Численные расчеты по потенциалу Майера-Заупе качественно и количественно оказались близкими к свойствам НЖК. Рост $\beta_{rr}(T)$ при фиксированных значениях плотности ещё объясним, а падение $\tau_{rr}(T)$ с ростом температуры, указывает о структурном характере вращательной релаксации в таких системах. Возможно это и так, ибо в жидких системах из стержнеобразных молекул с фиксированными центрами инерции вращательное движение может вызывать изменение ориентационной структуры.

На рис. 6*а* представлена расчётная (по потенциалу Майера-Заупе) температурная зависимость динамического объемного коэффициента вращательной вязкости ПАА для одной плотности, по выражение из (22). Видно, что характер $\eta_{rr}(T)$ соответствует жидкому состоянию и частично согласуется с экспериментальными результатами (выделенные области рис. 6*а* и рис. 6*б*) .

На графиках $\eta_{rr}(T)$, рассчитанных при ρ=const по потенциалу Мак-Миллана, как и в случае простых жидкостей, наблюдается слабый рост с увеличением температуры.

Отметим, что в этой главе показано, что использование очень упрощенных результатов качественно правильно описывает динамические вяз-

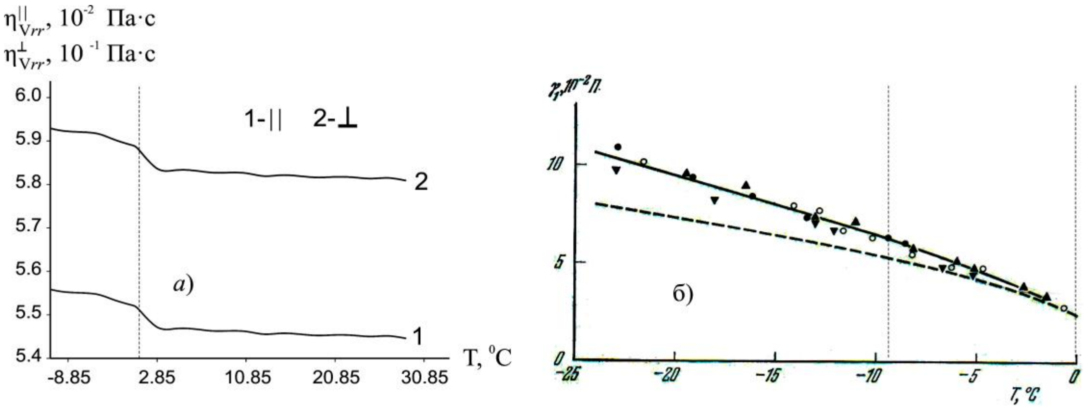

Рис. 6. Зависимость значения объемной вращательной вязкости ПАА от температуры при одной значении плотности.

коупругие свойства простых моделей анизотропных жидкостей. Следовательно, использование более общих выражений типа (21) позволяет более правильно описать вязкоупругие свойства более сложных жидкостей с произвольной формой молекул.

Выводы

1. Метод неравновесной функции распределения обобщен для описания динамических вязкоупругих свойств ассиметричных жидкостей, состоящих из жестких молекул произвольной формы. Более корректным учетом угловых характеристик несферических молекул и значительным расширением динамических переменных, характеризующих неравновесное состояние сложной жидкой системы, сформулированы локально-равновесной и неравновесной функций распределения молекул рассматриваемой модели жидкой системы;

2. Получена замкнутая система уравнений обобщенной гидродинамики, позволяющая исследовать динамические вязкоупругие свойства асимметричных жидкостей; впервые получены 9 общих аналитических выражения для комплексных обобщённых тензоров вязкостей, корректно учитывающих вклады, как от молекулярной структуры, так и происходящих в жидкостях термических релаксационных процессов;

3. Показано, что динамические вязкоупругие свойства асимметричных жидкостей характеризуются как набором значений динамических коэффициентов сдвиговых и объемных вязкостей, так и набором соответствующих им динамических модулей сдвиговых и объемных упругостей, обусловленных поступательными и вращательными степенями свободы несферических молекул, и их перекрестным взаимодействием;

4. Впервые проведен детальный анализ механизмов внутренних термических релаксационных процессов в асимметричных жидкостях и определен вклад последних в поведение динамических вязкоупругих характеристик рассматриваемой модели жидкости; установлено, что в определении динамического поведения вязкоупругих параметров каждой конкретной модели жидкости определяющую роль играет релаксационный процесс с наименьшим характерным временем релаксации;

5. С учетом молекулярной структуры конкретных моделей жидкости и определяющего механизма внутренних термических релаксационных процессов, получены упрощенные аналитические выражения обобщенных динамических коэффициентов вязкостей для данной простой модели асимметричной жидкости; показано, что простая модель асимметричной жидкости, где обмен энергии между одинаковыми степенями свободы молекул происходит гораздо быстрее, чем между различными степенями свободы, характеризуется, как минимум, пятью отличными от нуля значениями динамических коэффициентов вязкостей и динамических модулей упругости;

6. Анализированы асимптотики динамических коэффициентов вязкостей и соответствующих им динамических модулей упругости в областях предельно низких и предельно высоких частот; показано, что при $\nu \to \infty$ динамические вязкоупругие свойства жидкостей характеризуются высокочастотными значениями динамических модулями сдвиговой и объемной упругостей, а при $\nu \to 0$- статическими коэффициентами сдвиговой и объемной вязкостей;

7. Проведен численный расчет зависимостей характерных времен релаксации, коэффициентов трения, динамических коэффициентов вязкостей и соответствующих им динамических модулей упругости для жидкого аргона (простая жидкость) и п-азоксианизола-ПАА (простого нематического жидкого кристалла) от температуры, плотности и частоты; результаты численного расчета проявляют удовлетворительное качественное согласие с экспериментом.

Цитированная литература.

1. Фишер И.З. Статистическая теория жидкостей//М.:Физматгиз,1961.-280 с.
2. Физика простых жидкостей. Статистическая теория// М.: «Мир», 1971.-308 с.
3. Крокстон К. Физика жидкого состояния // М.: «Мир», 1978.-400 с.
4. Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертис, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей // М.: Иностранная литература, 1961.-930 с.
5. С.Одинаев, А.А.Адхамов. Молекулярная теория структурной релаксации и явлений переноса в жидкостях // Душанбе: Дониш, 1998.-230 с.
6. Д.Н. Зубарев Неравновесная статистическая термодинамика // М.: Наука, 1972.-280 с.

Список публикаций по теме диссертации

1.А.А.Абдурасулов, **А.Рахими**. О вязкоупругих коэффициентах асимметричных жидкостей при динамических процессах // Доклады АН Республики Таджикистан, 2003.-Т.56.-№10.-С.18-22.

2. А.А.Абдурасулов, **А.Рахими**, Н.Шохайдаров. К статистической теории явлений переноса и релаксации в асимметричных жидкостях // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук 2006.-№5.-С.103-108.

3. А.А.Абдурасулов, **А.Рахими**, Н. Шохайдаров. О динамических вязкоупругих свойствах некоторых простых моделей асимметричных жидкостей

// Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук, 2016.-№1/3(200).-С.119-124.

4. А.А. Абдурасулов, **А.Рахими**. Исследование зависимости вязкоупругих параметров жидкого аргона от плотности, температуры и частоты// Вестник Таджикского национального университета, 2016.-№1/3(200).-С.83-88.

5. А.А.Абдурасулов, **А.Рахими**. Некоторые вопросы статистической теории явлений переноса и релаксации в асимметричных жидкостях при динамических процессах // Мат. II Межд. научно-практической конф. «Перспективы развития науки и образования в XXI веке». Ч. 2, ТТУ им. М.С. Осими, Душанбе, 15-16 марта 2007.-С.56-60.

6. А.А.Абдурасулов, **А.Рахими**, Н.Шохайдаров. К статистической теории вязкоупругих свойств асимметричных жидкостей // Мат. III Межд. научно-практической конф. «Перспективы развития науки и образования в XXI веке». Таджикистан, Душанбе, 22-24 мая 2008.-С.265-268.

7. А.А.Абдурасулов, **А.Рахими**, Н.Шоайдаров. Исследование динамических вязкоупругих свойств жидкого аргона в зависимости от изменения плотности, температуры и частоты // Мат. Республиканской научно-практической конф. «Проблемы металлургии Таджикистана и пути их решения» (29-30 апреля 2016 г. Филиал НИТУ «МИС иС» в г. Душанбе). Душанбе, 2016.-С. 63-66.

8. Абдурасулов А.А., **Рахими А.**, Шоайдаров Н. Коэффициент внутреннего трения и исследование динамических вязкоупругих свойств простых жидкостей // Известия Таджикского отделения Международной академии наук высшей школы, 2016.-№1.-С.31-36.

9. Абдурасулов А.А., **Рахими А.**, Шоайдаров Н. Об одном подходе в молекулярной теории динамических вязкоупругих свойств простых жидкостей // Мат. VIII Межд. научно практической конф. «Перспективы развития науки и образования», ТТУ им. М.С. Осими, 3-4 ноября 2016.-С.113-116.

10. Абдурасулов А.А, Абдурасулов А.Д., **Рахими А.** О вращательной вязкости нематических жидких кристаллов //Там же.-С.116-120.