Прикладная математика и механика. Том 35, 1971

О СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВЯЗКО-УПРУГИХ СВОЙСТВ АСИММЕТРИЧНЫХ СРЕД

В. Б. Немцов

(Минск)

В рамках теории линейной реакции Кубо на основе классического гиббсовского формализма без привлечения известных дополнительных представлений получены выражения через временные корреляционные функции для четырех тензоров коэффициентов вязкости асимметричной среды. Независимо от аппарата временных корреляционных функций, путем рассмотрения приращения тензоров напряжений при наложении малой деформации, установлены выражения для предельных высокочастотных и адиабатических модулей упругости.

Макроскопические проявления внутренних (вращательных) степеней свободы находятся в центре внимания феноменологических теорий асимметричных сред (см., например, [1-4]). Согласно последним, движение сплошной среды описывается не только полем средних трансляционных скоростей, но и полем средних угловых скоростей собственного вращения частиц. Деформированное состояние определяется двумя тензорами скоростей деформации (двумя тензорами деформации), а напряженное состояние — тензорами обычных и моментных напряжений.

Вместе с тем многие важные характеристики поведения асимметричных сред не могут быть определены в рамках феноменологического подхода. Экспериментальное изучение также наталкивается на ряд затруднений.

Современные методы статистической теории необратимых процессов предоставляют принципиальную возможность теоретического определения характеристик поведения рассматриваемых систем.

Ранее на основе уравнения Лиувилля были статистически обоснованы законы сохранения для асимметричных сред [5]. Законы сохранения и необратимые процессы в этих средах рассматривались методом неравновесного статистического оператора Д. Н. Зубарева [6]. При статистическом обосновании законов сохранения и особенностей кинематики среды применялся метод коррелятивных функций условных распределений [7,8]. Полученные выражения для тензоров напряжений и моментных напряжений дали возможность проанализировать для них условия существования и симметрии.

Настоящая работа посвящена построению теории коэффициентов вязкости и модулей упругости для асимметричных сред.

Рассмотрим систему из N несферических молекул, характеризуемую гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\nu=1}^{N}\left[\frac{(p^\nu)^2}{m} + \sum_{k=1}^{3}\frac{(s_k{}'^{\nu})^2}{J_k}\right] + \frac{1}{2}\sum_{\nu,\mu}^{N}\Phi(\mathbf{r}^{\nu\mu}, \boldsymbol{\alpha}^\nu, \boldsymbol{\alpha}^\mu) \tag{1}$$

$$\boldsymbol{\alpha}^\nu = (\alpha_i{}^\nu), \qquad \mathbf{r}^{\nu\mu} = \mathbf{q}^\mu - \mathbf{q}^\nu$$

Здесь $\mathbf{p}^\nu$ — импульс частицы, канонически сопряженный радиус-вектору $\mathbf{q}^\nu$ ее центра инерции; $\mathbf{r}^{\nu\mu}$ — расстояние между частицами ν и μ;

α^ν — набор углов, определяющий ориентацию частицы; $s_k'^\nu$ — проекции собственного момента импульса молекулы на ее главные оси инерции; J_k — главные моменты инерции частицы; m — ее масса; Φ — потенциал парного взаимодействия (нецентральные силы).

Пусть под действием малого механического возмущения гамильтониан системы изменился на величину $\Delta H = -RZ(t)$. Тогда среднее изменение динамической переменной Q, согласно теории Кубо [9], определяется выражением

$$\Delta Q = -\frac{1}{\theta}\int\limits_0^\infty \langle R(0)\, Q^{\cdot}(s)\rangle\, Z(t-s)\, ds \qquad \left(\theta = kT,\ Q^{\cdot} = \frac{dQ}{dt}\right) \tag{2}$$

Здесь символ $\langle\ \rangle$ означает усреднение по равновесному каноническому ансамблю, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Но определение ΔH встречается с известными трудностями. Ранее для системы с центральным и нецентральным взаимодействием был предложен способ определения приращения гамильтониана [10], не связанный с введением дополнительных частных представлений о создании потока среды [11, 12]. Ниже предлагается более общий подход.

Рассмотрим систему, подвергнутую малой деформации, при которой частицы получают смещение $\mathbf{u}(\mathbf{q})$ и поворачиваются на малый угол $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{q})$. Изменение функции координат и импульсов, обусловленное деформацией, можно определить из соотношения для приращения функции фазовых координат системы материальных точек при бесконечно малом каноническом преобразовании [13], обобщенного на случай непрерывной среды

$$\Delta Q = \int [Q p_j]\, u_j d\mathbf{q} + \int [Q l_j]\, \varphi_j\, d\mathbf{q} \tag{3}$$

Здесь квадратные скобки означают скобки Пуассона, p_j и l_j — микроскопические плотности импульса и момента импульса, определяемые равенствами

$$p_i(\mathbf{q}) = \sum_{\nu=1}^{N} p_i^\nu \delta(\mathbf{q}^\nu - \mathbf{q}), \qquad l_i(\mathbf{q}) = \sum_{\nu=1}^{N} s_i^\nu \delta(\mathbf{q}^\nu - \mathbf{q}), \tag{4}$$

в которых δ — дельта-функция, s_i^ν — составляющие момента импульса частицы относительно системы отсчета.

Определим изменение гамильтониана при наложении деформации с помощью (3). Скобки Пуассона найдем из законов сохранения импульса и момента импульса [6-8]

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = [p_i H] = \frac{\partial \tau_{ij}^+}{\partial q_j} \tag{5}$$

$$\frac{\partial l_i}{\partial t} = [l_i H] = \frac{\partial \pi_{ij}^+}{\partial q_j} + e_{ijk}\tau_{kj}^+$$

где e_{ijk} — тензор Леви—Чивита.

Плотности потоков импульса (тензор напряжений) τ_{ik}^+ и момента импульса (тензор моментных напряжений) π_{ik}^+ даются равенствами [6,8]

$$\tau_{ik}^+ = \sum_{\nu=1}^{N} \left\{ -\frac{p_i^\nu p_k^\nu}{m} + \frac{1}{2} \sum_{\mu\neq\nu}^{N} F_i^{\nu\mu} x_k^{\nu\mu} \right\} \delta(\mathbf{q}^\nu - \mathbf{q}) \tag{6}$$

$$\pi_{ik}^+ = \sum_{\nu=1}^{N} \left\{ -\frac{s_i^\nu p_k^\nu}{m} + \frac{1}{2} \sum_{\mu\neq\nu}^{N} M_i^{\nu\mu} x_k^{\nu\mu} \right\} \delta(\mathbf{q}^\nu - \mathbf{q})$$

Здесь $x_k^{\nu\mu}$ — составляющие радиус-вектора $\mathbf{r}^{\nu\mu}$, $F_i^{\nu\mu}$ и $M_i^{\nu\mu}$ — составляющие силы и момента пары сил, действующих со стороны молекулы μ на молекулу ν.

Отметим, что в [8] приведены выражения для средних тензоров напряжений.

После интегрирования по частям и пренебрежения поверхностными интегралами представим (3) при $Q = H$ в форме

$$\Delta H = \int \tau_{ik}^+ \varepsilon_{ik} d\mathbf{q} + \int \pi_{ik}^+ \gamma_{ik} d\mathbf{q} \tag{7}$$

Здесь ε_{ik} и γ_{ik} — тензоры деформации

$$\varepsilon_{ik} = \frac{\partial u_i}{\partial q_k} - \varphi_m e_{mki}, \qquad \gamma_{ik} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial q_k} \tag{8}$$

Выражение для них иным способом было ранее статистически обосновано при выводе закона сохранения энергии [7].

Рассматривая случай однородной деформации, после интегрирования с использованием свойств δ-функции напишем окончательное выражение для ΔH

$$\Delta H = T_{ik}\varepsilon_{ik} + \Pi_{ik}\gamma_{ik} \tag{9}$$

$$T_{ik} = \int \tau_{ik}^+ d\mathbf{q} = -\sum_{\nu=1}^{N} \frac{p_i^\nu p_k^\nu}{m} + \frac{1}{2} \sum_{\nu,\mu}^{N} F_i^{\nu\mu} x_k^{\nu\mu} \tag{10}$$

$$\Pi_{ik} = \int \pi_{ik}^+ d\mathbf{q} = -\sum_{\nu=1}^{N} \frac{s_i^\nu p_k^\nu}{m} + \frac{1}{2} \sum_{\nu,\mu}^{N} M_i^{\nu\mu} x_k^{\nu\mu}$$

Согласно (9)

$$\Delta H = -R_1 Z_1 - R_2 Z_2, \quad R_1 = -T_{ik}, \quad R_2 = -\Pi_{ik}, \quad Z_1 = \varepsilon_{ik}, \quad Z_2 = \gamma_{ik}$$

Имея в виду (2), выберем

$$Q_1 = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{t} (T_{ik} - T_{ik}^\circ)\, dt, \qquad Q_2 = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{t} (\Pi_{ik} - \Pi_{ik}^\circ)\, dt$$

причем T_{ik}° и Π_{ik}° — инвариантные части от T_{ik} и Π_{ik} в смысле [14].

Предполагая в дальнейшем, что термодинамические функции равновесного состояния не зависят от средней плотности момента импульса $\langle \mathbf{l} \rangle$, можно, следуя предложению [15], записать выражения для инвариантных частей (используется канонический ансамбль) в виде

$$T_{ik}^{\circ} = \tau_{ik}V + \frac{\partial \tau_{ik}V}{\partial E}(H - E), \qquad \Pi_{ik}^{\circ} = \pi_{ik}V + \frac{\partial \pi_{ik}V}{\partial E}(H - E) \tag{11}$$

Здесь τ_{ik}, π_{ik} — средние равновесные тензоры обычных и моментных напряжений, E — внутренняя энергия, V — объем системы.

Тогда на основании (2) в случае циклического нагружения с частотой ω

$$\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{ik}(0)\, e^{i\omega t}, \qquad \gamma_{ik} = \gamma_{ik}(0)\, e^{i\omega t}$$

найдем, что

$$\Delta Q_1 = \left\{\frac{1}{\theta V}\int_0^\infty e^{-i\omega t}\langle T_{mn}(0)\,[T_{ik}(t) - T_{ik}^{\circ}(t)]\rangle\, dt\right\}\varepsilon_{mn} +$$

$$+ \left\{\frac{1}{\theta V}\int_0^\infty e^{-i\omega t}\langle \Pi_{mn}(0)\,[T_{ik}(t) - T_{ik}^{\circ}(t)]\rangle\, dt\right\}\gamma_{mn} \tag{12}$$

$$\Delta Q_2 = \left\{\frac{1}{\theta V}\int_0^\infty e^{-i\omega t}\langle T_{mn}(0)\,[\Pi_{ik}(t) - \Pi_{ik}^{\circ}(t)]\rangle\, dt\right\}\varepsilon_{mn} +$$

$$+ \left\{\frac{1}{\theta V}\int_0^\infty e^{-i\omega t}\langle \Pi_{mn}(0)\,[\Pi_{ik}(t) - \Pi_{ik}^{\circ}(t)]\rangle\, dt\right\}\gamma_{mn}$$

Сравнивая эти равенства с феноменологическими соотношениями

$$\int_{-\infty}^{t} \tau_{ik}'\, dt = a_{ikmn}\varepsilon_{mn} + b_{ikmn}\gamma_{mn} \tag{13}$$

$$\int_{-\infty}^{t} \pi_{ik}'\, dt = c_{ikmn}\varepsilon_{mn} + d_{ikmn}\gamma_{mn}$$

получим явные выражения для тензоров коэффициентов вязкости a_{ikmn}, b_{ikmn}, c_{ikmn}, d_{ikmn}, приведенные в (12) в фигурных скобках.

В формулах (13) τ_{ik}', π_{ik}' — тензоры вязких обычных и моментных напряжений. Предполагается, что $\tau_{ik}' \to 0$, $\pi_{ik}' \to 0$ при $t \to \infty$.

Выражения (12) показывают, что коэффициенты вязкости обладают частотной дисперсией, и позволяют непосредственно исследовать их свойства симметрии.

Пусть функции распределения, применяемые для усреднения при расчете коэффициентов вязкости, инвариантны относительно инверсии. Тогда средний равновесный тензор моментных напряжений обращается в нуль, так как он включает произведение псевдовектора M_i на вектор x_k. Выражения для величин b_{ikmn} и c_{ikmn} пропорциональны комбинациям $F_i x_k M_m x_n$, следовательно, при усреднении они обращаются в нуль, и вязкость анизотропной среды характеризуется двумя тензорами a_{ikmn} и d_{ikmn}. Изотропная негиротропная среда обладает шестью коэффициентами вязкостей. В общем же случае изотропной и гиротропной среды имеется двенадцать коэффициентов вязкости. Для систем с центральным взаимодействием вязкость описывается тензором a_{ikmn}, выражение для которого совпадает с полученным ранее [10].

На основании выражений для коэффициентов вязкости можно определить комплексные модули упругости A, B, C, D, описывающие вязкоупругое поведение среды при циклическом нагружении

$$A_{ikmn} = \overset{\circ}{A}_{ikmn} + i\omega a_{ikmn}, \qquad B_{ikmn} = \overset{\circ}{B}_{ikmn} + i\omega b_{ikmn} \tag{14}$$
$$C_{ikmn} = \overset{\circ}{C}_{ikmn} + i\omega c_{ikmn}, \qquad D_{ikmn} = \overset{\circ}{D}_{ikmn} + i\omega d_{ikmn}$$

Здесь A°, B°, C°, D° — адиабатические модули упругости при медленном нагружении ($\omega = 0$).

Совершая в (14) переход при $\omega \to \infty$, можно получить предельные высокочастотные модули упругости среды с моментными напряжениями.

В работах [16, 18] предельный переход рассмотрен для изотропной жидкости с центральным взаимодействием сферических молекул, когда комплексные объемный и сдвиговой модули упругости выражаются через коэффициенты объемной η_V и сдвиговой η вязкости соотношениями

$$K(\omega) = K_0 + i\omega\eta_V(\omega), \quad \mu(\omega) = i\omega\eta(\omega) \tag{15}$$

Предельные высокочастотные модули упругости (усреднение проведено в статистическом методе условных распределений в приближении F_{11} [17]) определяются равенствами

$$K_\infty = \frac{5}{3}\frac{\theta}{v} + \frac{2\pi}{9v^2}\int\limits_{r_0}^{\infty}\frac{d}{dr}\left(\frac{\Phi'(r)}{r^2}\right)\varphi(r)\,r^6\,dr \tag{16}$$
$$\mu_\infty = \frac{\theta}{v} + \frac{2\pi}{15v^2}\int\limits_{r_0}^{\infty}\frac{d}{dr}\left(r^4\Phi'(r)\right)\varphi(r)\,dr \qquad \left(v = \frac{4}{3}\pi r_0^3\right)$$

где v — молекулярный объем, r_0 — радиус молекулярной ячейки, $v^{-1}\varphi(r)$ представляет функцию условного распределения $F_{11}(q_2/q_1)$ [17,18].

Выражения для предельных высокочастотных модулей упругости асимметричной среды получим и другим методом, идея которого восходит к Грину [19] и применялась им к системе сферических молекул. Для этого найдем изменение в линейном приближении средних тензоров напряжений при наложении малой деформации, учитывая преобразование пространственных и угловых переменных, а также в отличие от [19] и импульсов.

Средние тензоры напряжений определяются выражениями

$$\tau_{ik} = -\frac{1}{m}\iint p_i p_k F_{11}\,d\mathbf{p}\,d\mathbf{s} + \frac{1}{2}\iiint F_i x_k F_{11}^{(1)}\,d\mathbf{r}\,d\boldsymbol{\alpha}\,d\boldsymbol{\alpha}' \tag{17}$$
$$\pi_{ik} = -\frac{1}{m}\iint s_i p_k F_{11}\,d\mathbf{p}\,d\mathbf{s} + \frac{1}{2}\iiint M_i x_k F_{11}^{(1)}\,d\mathbf{r}\,d\boldsymbol{\alpha}\,d\boldsymbol{\alpha}'$$

Усреднение записано с помощью равновесных функций распределения $F_{11}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ и $F_{11}^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}')$. Фактическое усреднение по импульсам будет выполнено после их преобразования.

Операцию усреднения удобно представить в форме

$$\tau_{ik} = \langle T_{ik}, F\rangle, \qquad \pi_{ik} = \langle \Pi_{ik}, F\rangle \tag{18}$$

Здесь $\langle, F\rangle$ означает усреднение в смысле (17). Приращение тензоров напряжений в линейном приближении можно записать как

$$\Delta\tau_{ik} = \langle \Delta T_{ik}, F\rangle + \langle T_{ik}, \Delta F\rangle \qquad (19)$$
$$\Delta\pi_{ik} = \langle \Delta\Pi_{ik}, F\rangle + \langle \Pi_{ik}, \Delta F\rangle$$

Изменение функций распределения в результате деформации определяется из условия неизменности соответствующих вероятностей.

Так как $d\mathbf{q}^+ = d\mathbf{q}\,(1 + \operatorname{div}\mathbf{u})$, то в силу малости деформации

$$F_{11}{}^+ d\mathbf{p}^+ d\mathbf{s}^+ = (1 - \operatorname{div}\mathbf{u})\, F_{11}\, d\mathbf{p}\, d\mathbf{s}$$
$$F_{11}{}^{(1)+} d\mathbf{r}^+ d\boldsymbol{\alpha}^+ d\boldsymbol{\alpha}'^+ = (1 - \operatorname{div}\mathbf{u})\, F_{11}{}^{(1)} d\mathbf{r}\, d\boldsymbol{\alpha}\, d\boldsymbol{\alpha}'$$

Это можно записать в виде

$$\Delta F = -F\frac{\partial u_i}{\partial q_i} = -F\delta_{jn}\varepsilon_{jn}$$

Тогда

$$\Delta\tau_{ik} = \langle \Delta T_{ik} - T_{ik}\delta_{jn}\varepsilon_{jn}, F\rangle, \qquad \Delta\pi_{ik} = \langle \Delta\Pi_{ik} - \Pi_{ik}\delta_{jn}\varepsilon_{jn}, F\rangle \qquad (20)$$

Определим ΔT_{ik} и $\Delta\Pi_{ik}$ на основании (3). Для преобразования соответствующих скобок Пуассона применим соотношения

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{q}^\nu} = -\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}^{\nu\mu}}, \qquad \frac{\partial}{\partial\mathbf{q}^\mu} = \frac{\partial}{\partial\mathbf{r}^{\nu\mu}} \qquad (21)$$

$$\delta(\mathbf{q}^\nu - \mathbf{q}) - \delta(\mathbf{q}^\mu - \mathbf{q}) = x_n{}^{\nu\mu}\frac{\partial\delta(\mathbf{q}^\nu - \mathbf{q})}{\partial q_n} + \ldots \qquad (22)$$

Для вычисления скобок Пуассона, содержащих плотность момента импульса, кроме того, используется равенство

$$\frac{\partial Q}{\partial\varphi_j{}^\nu} + \frac{\partial Q}{\partial\varphi_j{}^\mu} + e_{jnm}x_n{}^{\nu\mu}\frac{\partial Q}{\partial x_m{}^{\nu\mu}} = 0 \qquad (23)$$

Оно выражает неизменность функции $Q(\mathbf{r}^{\nu\mu}, \boldsymbol{\alpha}^\nu, \boldsymbol{\alpha}^\mu)$ переменных двух частиц относительно преобразований, сохраняющих взаимную ориентацию частиц и радиус-вектора, связывающего их центры инерции. Величины $\partial Q / \partial\varphi_i$ означают коэффициенты пропорциональности между линейной частью приращения функции Q (за счет изменения угловых переменных одной частицы) и составляющими угла малого поворота φ_i.

После вычисления величин ΔT_{ik} и $\Delta\Pi_{ik}$ запишем усреднение соотношений (20) в явном виде и, выполняя его по импульсам, получим

$$\Delta\tau_{ik} = [F_{11}\theta(\delta_{ij}\delta_{kn} + \delta_{kj}\delta_{in}) - \tau_{ik}\delta_{jn} + \qquad (24)$$
$$+ \frac{1}{2}\iiint\frac{\partial F_i x_k}{\partial x_j}\, x_n F_{11}{}^{(1)} d\mathbf{r}\, d\boldsymbol{\alpha}\, d\boldsymbol{\alpha}'\Big]\varepsilon_{jn} + \left[\frac{1}{2}\iiint\frac{\partial M_i}{\partial x_j}x_k x_n F_{11}{}^{(1)} d\mathbf{r}\, d\boldsymbol{\alpha}\, d\boldsymbol{\alpha}'\right]\gamma_{jn}$$

$$\Delta\pi_{ik} = \left[-\pi_{ik}\delta_{jn} + \frac{1}{2}\iiint\frac{\partial M_i x_k}{\partial x_j}\, x_n F_{11}{}^{(1)} d\mathbf{r}\, d\boldsymbol{\alpha}\, d\boldsymbol{\alpha}'\right]\varepsilon_{jn} +$$
$$+ \left[\frac{F_{11}\theta}{m}\left(\sum_{k=1}^{3} I_k\right)\delta_{kn}\delta_{ij} + \frac{1}{2}\iiint\frac{\partial M_i}{\partial\varphi_j{}'}x_k x_n F_{11}{}^{(1)} d\mathbf{r}\, d\boldsymbol{\alpha}\, d\boldsymbol{\alpha}'\right]\gamma_{jn}$$

Здесь M_i — момент пары сил, действующей на молекулу, ориентация которой определяется набором углов α.

Выражения в квадратных скобках определяют тензоры модулей упругости A^∞, B^∞, C^∞, D^∞ асимметричной среды при высокочастотном нагружении

$$\Delta\tau_{ik} = A_{ikmn}^\infty \varepsilon_{mn} + B_{ikmn}^\infty \gamma_{mn}, \quad \Delta\pi_{ik} = C_{ikmn}^\infty \varepsilon_{mn} + D_{ikmn}^\infty \gamma_{mn}$$

Убедимся в том, что рассматриваемые сейчас модули упругости будут предельными при $\omega \to \infty$ на примере изотропной среды с центральным взаимодействием, которая характеризуется одним тензором модулей упругости A_{ikmn}^∞.

Принимая во внимание, что $F_i = r^{-1}\Phi'(r)x_i$, после усреднения по ориентациям найдем

$$A_{ikmn}^\infty = \left[\frac{\theta}{v} - \frac{2\pi}{3v^2}\int_{r_0}^{\infty} \Phi'(r)\,\varphi r^3\,dr + \frac{2\pi}{15v^2}\int_{r_0}^{\infty} \frac{d}{dr}\left(\frac{\Phi'(r)}{r}\right)\varphi r^5\,dr\right]\delta_{ik}\delta_{mn} +$$

$$+\left[\frac{\theta}{v} + \frac{2\pi}{15v^2}\int_{r_0}^{\infty}\frac{d}{dr}\left(r^4\Phi'(r)\right)\varphi\,dr\right](\delta_{im}\delta_{kn} + \delta_{in}\delta_{km})$$

Отсюда следует, что выражения для K_∞ и μ_∞ полностью совпадают с выражениями (16), полученными при помощи предельного перехода в формулах для комплексных модулей упругости.

Соображения о симметрии тензоров модулей упругости аналогичны использованным ранее для тензоров коэффициентов вязкости и приводят к подобным же результатам.

Здесь можно еще легко установить, что в отсутствие начальных напряжений в силу равенств

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_j} = \frac{\partial F_j}{\partial x_i}, \qquad \frac{\partial M_i}{\partial \varphi_j'} = \frac{\partial M_j}{\partial \varphi_i'}$$

тензоры A и D симметричны относительно перестановки первой и второй пар индексов, а $B = C$.

Получим выражения для адиабатических модулей упругости асимметричных жидкостей, рассматривая снова изменение средних тензоров напряжений при наложении малой деформации.

Здесь в кинетических частях тензоров напряжений уже проведено усреднение по импульсам с помощью распределения Максвелла.

$$\tau_{ik} = -F_{11}\theta\delta_{ik} + \frac{1}{2}\iiint F_i x_k F_{11}^{(1)}\,d\mathbf{r}\,d\alpha\,d\alpha' \tag{25}$$

$$\pi_{ik} = \frac{1}{2}\iiint M_i x_k F_{11}^{(1)}\,d\mathbf{r}\,d\alpha\,d\alpha'$$

Для жидкостей при адиабатическом нагружнии ($\omega = 0$) приращение средних тензоров напряжений определяется изменением температуры и объема

$$\Delta\tau_{ik} = \left(\frac{\partial\tau_{ik}}{\partial T}\right)_v \Delta T + \left(\frac{\partial\tau_{ik}}{\partial v}\right)_T v\delta_{jn}\varepsilon_{jn} \tag{26}$$

$$\Delta\pi_{ik} = \left(\frac{\partial\pi_{ik}}{\partial T}\right)_v \Delta T + \left(\frac{\partial\pi_{ik}}{\partial v}\right)_T v\delta_{jn}\varepsilon_{jn}$$

Изменение температуры среды при адиабатической деформации выражается формулой, обобщающей известное соотношение для упругого тела с симметричным тензором напряжений [20],

$$\Delta T = \frac{Tv}{C_v}\left[\left(\frac{\partial\tau_{ik}}{\partial T}\right)_v \varepsilon_{ik} + \left(\frac{\partial\pi_{ik}}{\partial T}\right)_v \gamma_{ik}\right] \tag{27}$$

причем C_v — теплоемкость при постоянном объеме, отнесенная к одной частице. Обобщение включает появление второго слагаемого.

На основании (26) и (27) и получаются выражения для тензоров адиабатических модулей упругости

$$\overset{\circ}{A}_{ikmn} = \frac{Tv}{C_v}\left(\frac{\partial\tau_{ik}}{\partial T}\right)_v\left(\frac{\partial\tau_{mn}}{\partial T}\right)_v + \left(\frac{\partial\tau_{ik}}{\partial v}\right)_T v\delta_{mn}, \quad \overset{\circ}{B}_{ikmn} = \frac{Tv}{C_v}\left(\frac{\partial\tau_{ik}}{\partial T}\right)_v\left(\frac{\partial\pi_{mn}}{\partial T}\right)_v \tag{28}$$

$$\overset{\circ}{C}_{ikmn} = \frac{Tv}{C_v}\left(\frac{\partial\pi_{ik}}{\partial T}\right)_v\left(\frac{\partial\tau_{mn}}{\partial T}\right)_v + \left(\frac{\partial\pi_{ik}}{\partial v}\right)_T v\delta_{mn}, \quad \overset{\circ}{D}_{ikmn} = \frac{Tv}{C_v}\left(\frac{\partial\pi_{ik}}{\partial T}\right)_v\left(\frac{\partial\pi_{mn}}{\partial T}\right)_v$$

Переход к жидкости с центральным взаимодействием с учетом того, что $\tau_{ik} = -P\delta_{ik}$ (P — давление) приводит к известной формуле

$$\overset{\circ}{A}_{ikmn} = K_0\delta_{ik}\delta_{mn}, \qquad K_0 = \frac{Tv}{C_v}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v^2 - v\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T$$

Полученные выражения для коэффициентов вязкости и модулей упругости содержат зависимость от параметров межмолекулярного взаимодействия и термодинамического состояния среды и позволяют провести вычисление. Выражения для высокочастотных и адиабатических модулей упругости применимы также для определения коэффициентов вязкости с привлечением соответствующих времен релаксации [21].

Автор благодарит Д. Н. Зубарева за интерес к работе; Л. А. Ротта и Э. Л. Аэро за обсуждение и ценные замечания.

Поступила 26 XII 1969

ЛИТЕРАТУРА

1. Кувшинский Е. В., Аэро Э. Л. Континуальная теория асимметрической упругости. Учет «внутреннего» вращения. Физ. тв. тела, 1963, т. 5, вып. 9.
2. Пальмов В. А. Основные уравнения теории несимметричной упругости. ПММ, 1964, т. 28, вып. 3.
3. Аэро Э. Л., Булыгин А. Н., Кувшинский Е. В. Асимметрическая гидромеханика. ПММ, 1965, т. 29, вып. 2.
4. Snider R. F., Lewchuk K. S. Irreversible Thermodynamics of a Fluid System with Spin. J. Chem. Phys., 1967, vol. 46, No. 8.
5. Dahler I. S. Transport Phenomena in a Fluid Composed of Diatomic Molecules. J. Chem. Phys., 1959, vol. 30, No. 6.
6. Покровский Л. А. Необратимые процессы в системе с внутренними вращениями. Докл. АН СССР, 1967, т. 177, № 5.

7. Вихренко В. С., Немцов В. Б., Ротт Л. А. К статистическому обоснованию феноменологических уравнений сплошной среды. Аннот. докл. 3-й Всесоюзн. съезд по теорет. и прикл. механике. М., 1968.
8. Вихренко В. С., Немцов В. Б., Ротт Л. А. Кинетические функции для систем с вращательными степенями свободы. Докл. АН БССР, 1969, т. 13, № 1.
9. Кубо Р. Некоторые вопросы статистическо-механической теории необратимых процессов. В сб.: Термодинамика необратимых процессов. М., Изд-во иностр. лит., 1962.
10. Вихренко В. С., Немцов В. Б., Ротт Л. А. Статистическое определение тензора коэффициентов вязкости. ПММ, 1968, т. 32, вып. 5; Немцов В. Б., Брук-Левинсон Э. Т. К статистической теории вязкости асимметричных сред. Изв. АН БССР, Сер. физ.-мат., 1969, № 6.
11. Монтролл Е. О статистической механике процессов переноса. В сб.: Термодинамика необратимых процессов. М., Изд-во иностр. лит., 1962.
12. Комаров Л. И. К теории коэффициента объемной вязкости. ЖЭТФ, 1965, т. 48, вып. 1.
13. Голдстейн Г. Классическая механика. М., Гостехиздат, 1957.
14. Зубарев Д. Н. Метод неравновесного статистического оператора. В сб.: Проблемы теоретической физики. М., «Наука», 1969; Неравновесная статистическая термодинамика. М., «Наука», 1971.
15. McLennan I. A. The Formal Statistical Theory of Transport Processes. Advances Chem. Phys., vol. 5. New York — London, Interscience, 1963.
16. Zwanzig R., Mountain R. D. High-Frequency Elastic Moduli of Simple Fluids. J. Chem. Phys., 1965, vol. 43, No. 12.
17. Ротт Л. А. К статистической теории конденсированных систем. Ж. физ. химии, 1958, т. 32, вып. 6; Кинетические функции в статистике конденсированных систем. Докл. АН БССР, 1958, т. 2, № 2.
18. Брук-Левинсон Э. Г., Немцов В. Б., Ротт Л. А. Статистическое вычисление комплексного объемного модуля упругости, Акуст. ж., 1970, т. 16, вып. 2.
19. Green H. S. The Molecular theory of fluids. Amsterdam, North Holland publ. co., 1952.
20. Физическая акустика, т. I, ч. А. М., «Мир», 1966.
21. Вихренко В. С., Ротт Л. А., Немцов В. Б. Статистическое вычисление времени релаксации анизотропии через параметры межмолекулярного взаимодействия. Оптика и спектроскопия, 1970, т. 28, вып. 2.