Физика низких температур, 1995, т. 21, № 8, с. 872–873

Краткие сообщения УДК 539

Асимптотика при больших временах автокорреляционной функции скорости молекулы жидкости с неаналитической дисперсией вязкости

А. В. Затовский, А. В. Сайко

Одесский государственный университет им. И. И. Мечникова,
Украина, 270100, г. Одесса, ул. П. Великого, 2

Статья поступила в редакцию 10 ноября 1994 г., после переработки 21 марта 1995 г.

Изучена гидродинамическая асимптотика автокорреляционной функции скорости молекулы, дрейфующей в поле тепловых флуктуаций вместе с ближайшим окружением. Расчеты проведены для жидкостей, затвердевающих при температурах меньших дебаевской температуры. В этом случае частотная дисперсия вязкости неаналитическая. Показано, что главный асимптотический вклад в автокорреляционную функцию скорости молекулы такой жидкости пропорционален $t^{-5/4}$.

Вивчено гідродинамічну асимптотику автокореляційної функції швидкості молекули, яка дрейфує у полі теплових флуктуацій разом з найближчим оточенням. Розрахунки проведено для рідин, що твердіють при температурах нижчих дебаєвської температури. Для таких рідин частотна дисперсія в'язкості неаналітична. Показано, що головний асимптотичний внесок в автокореляційну функцію швидкості молекули такої рідини є пропорційним $t^{-5/4}$.

При исследовании движения молекул жидкости представляет существенный интерес изучение поведения автокорреляционной функции (АКФ) скорости молекулы $\varphi(t)$. Поведение АКФ скорости для молекул простой жидкости известно из «экспериментов» на ЭВМ [1–2]. В этих работах найдены степенные законы убывания во времени $\varphi(t) \sim t^{-3/2}$ и $\varphi(t) \sim t^{-1}$ при $t \to \infty$ соответственно для трех- и двумерной моделей жидкости. Подобное поведение подтверждено как при гидродинамическом подходе к проблеме, так и при кинетическом, учитывающем крупномасштабные флуктуации. Долгоживущие корреляции в молекулярных процессах сказываются на особенностях дисперсии кинетических коэффициентов: корреляционные функции, определяющие эти коэффициенты, также обладают дальновременными степенными «хвостами».

В настоящей работе методом, изложенным в [3,4], изучена гидродинамическая асимптотика АКФ скорости молекулы, дрейфующей в поле тепловых флуктуаций вместе с ближайшим окружением в жидкостях, затвердевающих при температурах меньших дебаевской температуры. При этом использованы гидродинамические уравнения, описывающие тепловые движения жидкости с учетом длинноволновых слабозатухающих звуковых, вязких и энтропийных волн, полученные Андреевым [5,6]. Они состоят из связанных уравнений гидродинамического типа и кинетических уравнений Больцмана для функций распределения флуктуаций. В простейшем случае неограниченной жидкости функции распределения в однорелаксационном приближении находятся в явном виде и могут быть исключены из уравнений. В результате получаются уравнения гидродинамики с дополнительными вкладами в термодинамические функции и нелокальными кинетическими коэффициентами.

Дальновременная асимптотика АКФ скорости молекулы жидкости определяется поперечной составляющей эйлерового поля скорости [3]. Поэтому из результатов Андреева следует использовать значение эффективной сдвиговой вязкости с учетом лишь ее дисперсии, обусловленной длинноволновыми флуктуациями. Ограничиваясь лишь учетом частотной дисперсии для сдвиговой вязкости $\eta(\omega) = \eta + \delta\eta(\omega)$, имеем

$$\delta\eta(\omega) = -\frac{T}{12\pi}(\rho/\gamma)^{3/2}\sqrt{-i\omega} \times$$

$$\times \left(\frac{7}{40}(2\gamma/\eta)^{3/2} - \frac{11}{20}F\right), \qquad (1)$$

где продольная вязкость

$$\gamma = 4\eta/3 + \xi + \chi\left(c_V^{-1} - c_P^{-1}\right);$$

$$F = \frac{\omega}{3cq}\left[\left(1 + cq/\omega\right)^{3/2} - \left(1 - cq/\omega\right)^{3/2}\right] \simeq 1;$$

η, ξ, χ — коэффициенты первой и второй вязкости и теплопроводности; c_V, c_P — удельные теплоемкости при постоянном объеме и давлении; ω, q —

© А. В. Затовский, А. В. Сайко, 1995

частота и волновой вектор моды теплового движения; c — скорость звука.

Гидродинамическую асимптотику АКФ скорости молекулы находим методом Фишера [3] как эйлерову АКФ поля скорости при совпадающих пространственных аргументах:

$$\varphi(t) = \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}, 0)\, \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \rangle , \qquad (2)$$

где угловые скобки означают усреднение по распределению тепловых флуктуаций гидродинамических полей. В спектральной плотности пространственно-временной АКФ скорости для несжимаемой жидкости

$$\langle |\mathbf{u}|^2 \rangle_{\omega q} = \mathrm{Re} \frac{T}{\rho} \left(-i\omega + q^2 \eta(\omega)/\rho \right)^{-1} , \qquad (3)$$

вязкость аппроксимируем выражением, учитывающим наряду с максвелловской релаксацией дополнительный неаналитический вклад (1)

$$\eta(\omega) = \eta / \left(1 + a\sqrt{-i\omega\tau} - i\omega\tau \right) \qquad (4)$$

так, чтобы $a\sqrt{-i\omega\tau} = -\delta\eta(\omega)/\eta$.

В этом случае, используя методы и результаты работ [3,4,7], находим

$$\varphi(\omega) = 2D\,\mathrm{Re} \left(1 + \frac{a}{a + \sqrt{-i\omega\tau}} \right)^{1/2} \left(b + b^2/2 \right) \qquad (5)$$

с коэффициентом лагранжевой диффузии $D = T/16\pi\eta\sqrt{\tau\nu}$ (ν — кинематическая вязкость) и обозначением

$$b = 1 + 2a\sqrt{-i\omega\tau} - 2i\omega\tau - \left[\left(1 + 2a\sqrt{-i\omega\tau} - 2i\omega\tau \right)^2 - 1 \right]^{1/2} . \qquad (6)$$

В пределе $a = 0$ отсюда получаем результат, приведенный в [4]. Если же $a \neq 0$, то при $\omega \to 0$ из (5) следует неаналитичность фурье-образа для АКФ скорости

$$\varphi(\omega) = D\left(3 - 4\sqrt{2a}\,(\omega\tau)^{1/4} + \ldots \right) = D\left(3 - 4\left| 2\delta\eta(\omega)/\eta \right|^{1/2} + \ldots \right) , \qquad (7)$$

тесно связанная с поведением сдвиговой вязкости, определяемой выражением (1). Соответствующие неаналитичности при $\omega \to 0$ возникают и у некогерентной части динамического структурного фактора

$$S(\omega, q) \sim \varphi(\omega) q^2/\omega^2 . \qquad (8)$$

Главный асимптотический вклад во временном представлении имеет вид

$$\varphi(t) \sim \frac{D\sqrt{a}}{\tau} (\tau/t)^{5/4} \qquad (9)$$

и незначительно, но все же отличается от традиционного поведения временной корреляционной функции скорости молекулы, пропорционального $t^{-3/2}$.

Таким образом, учет слабозатухающих фононов приводит к более медленному спаданию АКФ скорости молекулы со временем. Заметить различие между асимптотическим поведением функций, убывающих по законам $t^{-3/2}$ и $t^{-5/4}$, путем сравнения, например, с результатами машинного счета [1,2] практически невозможно. В [8] обсуждаются ограничения используемого численного метода, требующего для анализа «хвостов» большого числа частиц при моделировании на значительном временном интервале, и трудности воспроизведения временных «хвостов» АКФ, связанных с вязкостью. Важнейшим следствием наличия дальновременной алгебраической асимптотики АКФ, полученной в [1,2], является применимость гидродинамики на очень малых расстояниях и временных интервалах. В [3,4] было показано, что область приближенной применимости асимптотической оценки АКФ, построенной аналитически на гидродинамическом подходе, простирается далеко в сторону малых времен, и это свойство может быть усилено за счет использования более совершенных гидродинамических моделей. В связи с этим возникает возможность изучить в широком временном интервале АКФ скорости молекулы жидкости с дисперсией кинетических коэффициентов из [5,6], учитывающих в полной мере кинетику флуктуаций акустических, вязких и энтропийных возбуждений.

1. B. J. Alder and T. E. Wainwright, *Phys. Rev.* **A1**, 18 (1970).
2. T. E. Wainwright, B. J. Alder, and D. V. Gass, *Phys. Rev.* **A4**, 233 (1971).
3. И. З. Фишер, *ЖЭТФ* **61**, 1647 (1971).
4. И. З. Фишер, А. В. Затовский, Н. П. Маломуж, *ЖЭТФ* **65**, 297 (1973).
5. А. Ф. Андреев, *ЖЭТФ* **75**, 1132 (1978).
6. А. Ф. Андреев, *ЖЭТФ* **78**, 2064 (1980).
7. А. А. Затовская, А. В. Сайко, *Физика жидк. состояния* **14**, 89 (1986).
8. B. J. Alder, *Physica* **A188**, 413 (1983).

Long-time asymptote of the molecular velocity autocorrelation function for a liquid with non-analytic viscosity dispersion

A. V. Zatovsky and A. V. Saiko

The long-time asymptotics of the hydrodynamic velocity autocorrelation function of a molecule that drifts together with its environment in the field of thermal fluctuations is studied. The calculations are performed for a model of liquids solidified at temperatures lower than the Debay one. In this case the frequency dispersion of viscosity is nonanalytic. It is shown that the main contribution to the velocity autocorrelation function of such a molecule is proportional to $t^{-5/4}$.