ВЕСЦІ АКАДЭМІІ НАВУК БЕЛАРУСКАЙ ССР № 6 1969
СЕРЫЯ ФІЗІКА-МАТЭМАТЫЧНЫХ НАВУК

УДК 539.55+539.6

*В. Б. НЕМЦОВ, Э. Т. БРУК-ЛЕВИНСОН*

# К СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВЯЗКОСТИ АСИММЕТРИЧНЫХ СРЕД

За последние годы широкое развитие получили феноменологические исследования сплошных сред с моментными напряжениями (асимметричных сред) (см., например, [1]). Одной из важных особенностей теории является учет вращательных степеней свободы частиц. В соответствии с этим в кинематику сплошной среды наряду с полем трансляционных скоростей вводится поле угловых скоростей собственного вращения частиц и постулируется существование двух тензоров скоростей деформаций (или тензоров деформаций). Напряженное состояние среды характеризуется асимметричными в общем случае тензорами обычных и моментных напряжений.

Вместе с тем многие важные характеристики вязко-упругого поведения сплошных сред с моментными напряжениями не могут быть определены в рамках феноменологической теории. Законы сохранения также должны получить последовательное физическое обоснование. При этом главным остается необходимость установления связи между макроскопическими свойствами (параметрами) системы и характером межмолекулярного взаимодействия.

Ранее статистически были обоснованы законы сохранения и особенности кинематики сплошной среды [2—4]. Получены статистические выражения для тензоров напряжений и моментных напряжений, что дало возможность установить условия существования асимметричности тензора напряжений и наличия моментных напряжений.

Необходимым условием асимметричности тензора напряжений является нецентральность сил межмолекулярного взаимодействия, а аналогичное условие существования моментных напряжений связано с наличием пар сил, действующих на молекулы. Достаточные условия определяются свойствами функции распределения (отсутствием центра симметрии у системы частиц).

Ниже в рамках формализма Кубо получены выражения через временные корреляционные функции для четырех тензоров коэффициентов вязкости произвольной анизотропной среды с моментными напряжениями.

Рассмотрим систему из несферических молекул. Состояние отдельной молекулы характеризуется радиус-вектором $\mathbf{q}$ ее центра инерции, сопряженным импульсом $\mathbf{p}$, углами Эйлера $\alpha_i$, определяющими ориентацию молекулы, и собственным моментом импульса $\mathbf{s}$. Предположим, что взаимодействие молекул описывается парным потенциалом $\Phi(\mathbf{r}^{\nu\mu}, \alpha_i^\nu, \alpha_i^\mu)$, зависящим от расстояния между их центрами инерции и от взаимной ориентации молекул (нецентральные силы). Для системы из $N$ частиц гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\nu=1}^{N}\left[\frac{(p^\nu)^2}{m} + \sum_{k=1}^{3}\frac{\left(\sum_{i=1}^{3} B_{ki}s_i'^{\nu}\right)^2}{I_k}\right] + \frac{1}{2}\sum_{\nu,\mu}^{N}\Phi(\mathbf{r}^{\nu\mu}, \alpha_i^\mu, \alpha_i^\nu). \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{r}^{\nu\mu} = \mathbf{q}^{\mu} - \mathbf{q}^{\nu}$ — расстояние между частицами $\nu$ и $\mu$, $s'_i$ — обобщенные импульсы, канонически сопряженные углам Эйлера $\alpha_i$, $B_{ki}$ — матрица перехода от обобщенных импульсов к проекциям момента импульса на главные оси инерции молекулы, $I_k$ — главные моменты инерции молекулы, $m$—ее масса.

Пусть система подвержена действию малого механического возмущения, при котором ее гамильтониан $H$ изменяется на $\Delta H = -AF(t)$. Тогда среднее изменение $\Delta B(t)$ динамической величины $B(t)$ определяется, согласно [5], соотношением

$$\Delta B(t) = -\theta^{-1} \int_0^\infty \langle A(0) \dot{B}(s) \rangle F(t-s)\, ds, \tag{2}$$

где $\theta = kT$, $k$ — постоянная Больцмана, $T$ — абсолютная температура, $\dot{B} = \dfrac{dB}{dt}$, а угловые скобки означают усреднение по равновесному каноническому ансамблю.

Для определения вида величины $A$ поступим аналогично [6]. Наложим на систему малую деформацию и найдем приращение гамильтониана.

Изменения взаимного расстояния между центрами инерции двух частиц определяется уравнением

$$\tilde{x}_n = x_n + \varepsilon_{nm} x_m, \tag{3}$$

где $x_n$ — составляющие радиус-вектора $\mathbf{r}$ до деформации, а $\tilde{x}_n$ — после деформации; $\varepsilon_{ij} = \dfrac{\partial u_i}{\partial q_j} - \delta_k e_{kji}$ — тензор деформаций, $u_i$ — вектор смещения частицы, $\delta_k$ — вектор бесконечно малого поворота частицы, $e_{ifk}$ — тензор Леви-Чивитта.

При наложении деформации одна из частиц повернется относительно второй на малый угол $\theta_i = \delta_i(\mathbf{q} + \mathbf{r}) - \delta_i(\mathbf{q})$. В линейном приближении

$$\theta_i = \gamma_{ik} x_k, \tag{4}$$

где $\gamma_{ik} = \dfrac{\partial \delta_i}{\partial q_k}$ — второй тензор деформации.

Подчеркнем, что вид тензоров деформаций $\varepsilon_{ik}$ и $\gamma_{ik}$ статистически обоснован ранее в [3] на основании выражения для работы деформирования среды.

Пусть $\beta_i$ — углы Эйлера, описывающие ориентацию одной из частиц, относительно системы координат, связанной с другой частицей. Тогда изменение углов $\beta_i$, обусловленное малой деформацией, можно в линейном приближении представить в виде

$$\tilde{\beta}_i = \beta_i + A_{ik} \gamma_{kj} x_j. \tag{5}$$

Здесь $A_{ik}(\beta_j)$ — матрица перехода от составляющих вектора малого поворота по осям системы координат, относительно которой изучается движение среды, к соответствующим приращениям углов Эйлера [7].

При указанном преобразовании пространственных и угловых координат обобщенные импульсы частиц преобразуются следующим образом:

$$p_n = \tilde{p}_m \frac{\partial \tilde{x}_m}{\partial x_n} + \tilde{s}'_m \frac{\partial \tilde{\beta}_m}{\partial x_n},$$
$$s'_n = \tilde{p}_m \frac{\partial \tilde{x}_m}{\partial \beta_n} + \tilde{s}'_m \frac{\partial \tilde{\beta}_m}{\partial \beta_n}. \tag{6}$$

В линейном по деформации приближении на основании (3), (5) и (6) можно записать

$$\tilde{p}_i = p_i - \varepsilon_{ki} p_k - A_{jk} \gamma_{ki} s_j'.$$

Подобным же образом для импульсов, канонически сопряженных углам Эйлера, устанавливается соотношение

$$\tilde{s}_i' = s_i' - \frac{\partial A_{nk}}{\partial \beta_i} \gamma_{kj} x_j s_n'.$$

Теперь, используя для $H$ выражение (1), после простых преобразований найдем выражение для $\Delta H = \tilde{H} - H$ в форме

$$\Delta H = \hat{\Pi}_{ik} \varepsilon_{ik} + \hat{P}_{ik} \gamma_{ik}. \tag{7}$$

Здесь

$$\hat{\Pi}_{ik} = - \sum_{\nu=1}^{N} \frac{p_i^\nu \, p_k^\nu}{m} + \frac{1}{2} \sum_{\nu,\mu}^{N} F_i^{\nu\mu} \, x_k^{\nu\mu}, \tag{8}$$

$$\hat{P}_{ik} = - \sum_{\nu=1}^{N} \frac{p_i^\nu \, s_k^\nu}{m} + \frac{1}{2} \sum_{\nu,\mu}^{N} M_i^{\nu\mu} \, x_k^{\nu\mu} -$$

$$- \sum_{\nu=1}^{N} \sum_{n=1}^{3} \frac{1}{I_n} \left[ B_{nj} B_{nm} \frac{\partial A_{li}}{\partial \beta_m} + B_{nj} \frac{\partial B_{nl}}{\partial \beta_m} A_{mi} \right] s_j'^\nu \, s_l'^\nu \, x_k^{\nu\mu}$$

(в последнем члене $\mu$ фиксировано); $F_i^{\nu\mu}$ и $M_i^{\nu\mu}$ — составляющие в неподвижной системе координат силы и момента пары сил, действующих со стороны молекулы $\nu$ на молекулу $\mu$, $s_k$ — составляющие собственного момента импульса частицы относительно неподвижной системы координат.

Как следует из законов сохранения импульса и момента импульса [3, 4], средние величины $\frac{\langle \hat{\Pi}_{ik} \rangle}{V}$ и $\frac{\langle \hat{P}_{ik} \rangle}{V}$ представляют соответственно тензор напряжений и тензор моментных напряжений (тензор поверхностных моментов). В законе сохранения момента импульса член в квадратных скобках в выражении для $\hat{P}_{ik}$ отсутствует. Действительно, если произвести требуемое для получения тензора моментных напряжений усреднение, включающее усреднение и по угловым переменным, то этот член исчезнет. Поэтому в дальнейшем используется следующее выражение для $\hat{P}_{ik}$:

$$\hat{P}_{ik} = - \sum_{\nu=1}^{N} \frac{p_i^\nu \, s_k^\nu}{m} + \frac{1}{2} \sum_{\nu,\mu}^{N} M_i^{\nu\mu} \, x_k^{\nu\mu}. \tag{9}$$

Сопоставляя (7) с выражением $\Delta H = -AF(t)$, найдем, что в данном случае $\Delta H = -A_1 F_1(t) - A_2 F_2(t)$, где

$$A_1 = -\hat{\Pi}_{ik}, \quad A_2 = -\hat{P}_{ik}, \quad F_1(t) = \varepsilon_{ik}, \quad F_2(t) = \gamma_{ik}.$$

Тогда, выбрав $B_1 = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{t} \hat{\Pi}_{mn}(s)\, ds$ ($V$ — объем системы), $B_2 = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{t} \hat{P}_{mn}(s)\, ds$, на основании (2) получим

$$\Delta B_1 = \frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty \langle \hat{\Pi}_{ik}(0)\,\hat{\Pi}_{mn}(s)\rangle\,\varepsilon_{mn}(t-s)\,ds +$$

$$+\frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty \langle \hat{P}_{ik}(0)\,\hat{\Pi}_{mn}(s)\rangle\,\gamma_{mn}(t-s)\,ds,$$

$$\Delta B_2 = \frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty \langle \hat{\Pi}_{ik}(0)\,\hat{P}_{mn}(s)\rangle\,\varepsilon_{mn}(t-s)\,ds +$$

$$+\frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty \langle \hat{P}_{ik}(0)\,\hat{P}_{mn}(s)\rangle\,\gamma_{mn}(t-s)\,ds.$$

Рассмотрим поведение среды при наложении циклической деформации с частотой $\omega$

$$\varepsilon_{mn}(t) = \varepsilon_{mn}(0)\,e^{i\omega t},$$

$$\gamma_{mn}(t) = \gamma_{mn}(0)\,e^{i\omega t}.$$

В этом случае величины $\Delta B_1$ и $\Delta B_2$ приобретают вид

$$\Delta B_1 = \left[\frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty e^{-i\omega s}\langle \hat{\Pi}_{ik}(0)\,\hat{\Pi}_{mn}(s)\rangle\,ds\right]\varepsilon_{mn}(t) +$$

$$+\left[\frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty e^{-i\omega s}\langle \hat{P}_{ik}(0)\,\hat{\Pi}_{mn}(s)\rangle\,ds\right]\gamma_{mn}(t),$$

$$\Delta B_2 = \left[\frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty e^{-i\omega s}\langle \hat{\Pi}_{ik}(0)\,\hat{P}_{mn}(s)\rangle\,ds\right]\varepsilon_{mn}(t) +$$

$$+\left[\frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty e^{-i\omega s}\langle \hat{P}_{ik}(0)\,\hat{P}_{mn}(s)\rangle\,ds\right]\gamma_{mn}(t).$$

Сравним эти выражения с соответствующими феноменологическими выражениями

$$\int\limits_{-\infty}^{t} \sigma_{ik}\,ds = a_{ikmn}\varepsilon_{mn} + b_{ikmn}\gamma_{mn},$$

$$\int\limits_{-\infty}^{t} \pi_{ik}\,ds = c_{ikmn}\varepsilon_{mn} + d_{ikmn}\gamma_{mn}.$$

Здесь $\sigma_{ik}$ и $\pi_{ik}$ — тензоры вязких обычных и моментных напряжений (предполагается, что при $t\to-\infty$ $\sigma_{ik}\to 0$ и $\pi_{ik}\to 0$).

В результате сравнения получаются искомые выражения для четырех тензоров коэффициентов вязкости среды с моментными напряжениями

$$a_{ikmn}(\omega) = \frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty e^{-i\omega s}\langle \hat{\Pi}_{ik}(0)\,\hat{\Pi}_{mn}(s)\rangle\,ds,$$

$$b_{ikmn}(\omega) = \frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty e^{-i\omega s}\langle\, \hat{P}_{ik}(0)\,\hat{\Pi}_{mn}(s)\,\rangle\, ds,$$

$$c_{ikmn}(\omega) = \frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty e^{-i\omega s}\langle\, \hat{\Pi}_{ik}(0)\,\hat{P}_{mn}(s)\,\rangle\, ds, \tag{10}$$

$$d_{ikmn}(\omega) = \frac{1}{\theta V}\int\limits_0^\infty e^{-i\omega s}\langle\, \hat{P}_{ik}(0)\,\hat{P}_{mn}(s)\,\rangle\, ds.$$

Необходимо отметить, что потоки $\hat{\Pi}_{ik}$ и $\hat{P}_{ik}$ определены с точностью до величин, дивергенция которых равна нулю. Для устранения этой неоднозначности, согласно Мак-Леннану [8], необходимо в (10) $\hat{\Pi}_{ik}$ заменить на $\hat{\Pi}_{ik} - \overline{\Pi}_{ik}$, а $\hat{P}_{ik}$ на $\hat{P}_{ik} - \overline{P}_{ik}$; аналогично преобразуются величины $\hat{\Pi}_{mn}$ и $\hat{P}_{mn}$.

Здесь

$$\overline{\Pi}_{ik} = \sigma_{ik}^0 V + \frac{\partial \sigma_{ik}^0 V}{\partial E}(H - E);$$

$\sigma_{ik}^0$ — средний равновесный тензор напряжений; $E$ — среднее значение энергии;

$$\overline{P}_{ik} = P_{ik}^0 V + \frac{\partial P_{ik}^0 V}{\partial E}(H - E);$$

$P_{ik}^0$ — средний равновесный тензор моментных напряжений.

Для изотропной среды каждый из тензоров коэффициентов вязкости приобретает вид

$$a_{ikmn} = a_1\delta_{ik}\delta_{mn} + a_2\delta_{im}\delta_{kn} + a_3\delta_{in}\delta_{km},$$

и среда характеризуется двенадцатью коэффициентами вязкости.

Рассмотрим среду, обладающую центром симметрии. Функции распределения, применяемые для усреднения при вычислении коэффициентов вязкости, инвариантны относительно инверсии.

Так как выражения для величин $b_{ikmn}$ и $c_{ikmn}$ пропорциональны комбинациям $F_i x_k M_m x_n$, в которых $M_m$ — псевдовектор, то при усреднении величины $b_{ikmn}$ и $c_{ikmn}$ обращаются в нуль. Вязкость анизотропной среды характеризуется в этом случае двумя тензорами $a_{ikmn}$ и $d_{ikmn}$, а при переходе к изотропной среде — шестью коэффициентами вязкости.

Отметим, что равновесный тензор моментных напряжений негиротропной среды также обращается в нуль в силу того, что он включает произведение псевдовектора $M_i$ на вектор $x_k$.

Авторы выражают искреннюю благодарность Л. А. Ротту и В. С. Вихренко за ценное обсуждение.

## Литература

1. Аэро Э. Л., Булыгин А. Н., Кувшинский Е. В. ПММ, **29**, в. 2, 1965.
2. Покровский Л. А. ДАН СССР, **177**, № 5, 1967.
3. Немцов В. Б., Ротт Л. А., Вихренко В. С. Докл. на III Всес. съезде по теор. и прикл. механике. Анн. докл. Изд. АН СССР, 1968.
4. Немцов В. Б., Ротт Л. А., Вихренко В. С. ДАН БССР, **13**, № 1, 1969.
5. Кубо Р. Сб. «Термодинамика необратимых процессов». ИЛ, 1962.
6. Вихренко В. С., Немцов В. Б., Ротт Л. А. ПММ, **32**, в. 5, 1968.
7. Лурье А. И. Аналитическая механика. М., 1961.
8. McLennan I. A. Progr. Theor. Phys., **30**, № 3, 1963.

*Белорусский технологический институт*

*Поступило в редакцию 14.V 1969*