



# Транспортные коэффициенты системы «мягких» сфер

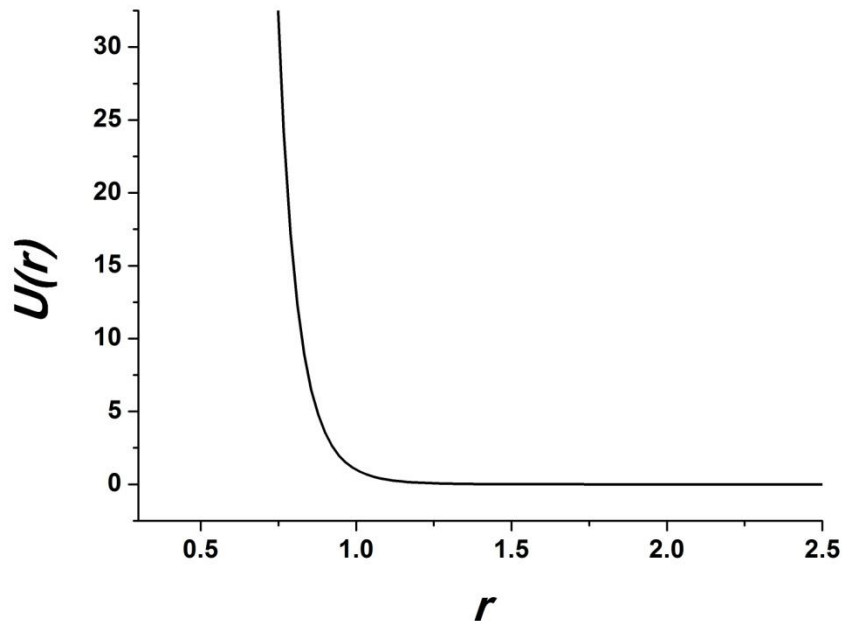
---

Ю. Д. Фомин, В.Н. Рыжов, В.В. Бражкин  
Институт Физики Высоких Давлений  
РАН

# Система мягких сфер

---

$$U(r) = \varepsilon \left( \frac{\sigma}{r} \right)^n$$



Молекулярная динамика

NVE ансамбль

1000 частиц

Шаг по времени –  $dt=0.0001$

Термализация – 500 тыс. шагов

Вычисления – 2.5 млн. шагов

Диффузия – по формуле  
Эйнштейна

Вязкость – из формулы  
Грина - Кубо

# Система мягких сфер: скейлинг

В. В. Жаховский, ЖЭТФ, 105, 1615 (1994)

$$\frac{dp_i}{dt} = - \frac{\partial U}{\partial q_i}$$

$$K(a \cdot p_i) = a^2 K(p_i)$$

$$U(a \cdot q_i) = a^s U(q_i)$$

$$q_i' = a q_i$$

$$p_i' = b p_i$$

$$t' = c t$$

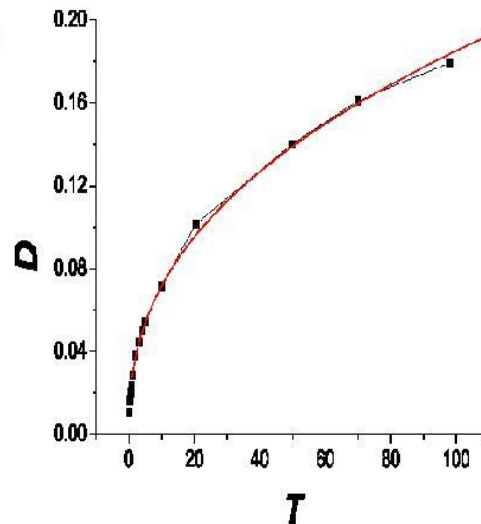
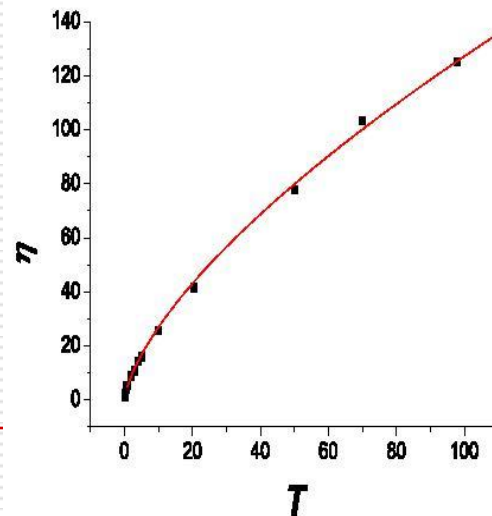
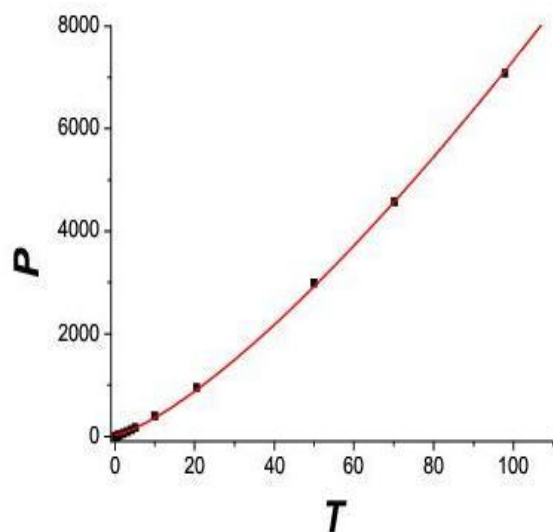
$$\Rightarrow \begin{aligned} b^2 &= a^s \\ c^2 &= a^{2-s} \end{aligned}$$

$$V = a^3 V_0$$

$$P = \frac{NT}{V} - \frac{1}{3V} \left\langle \sum q_i \frac{\partial U}{\partial q_i} \right\rangle \Rightarrow$$

$$P = P_0 \left( \frac{T}{T_0} \right)^{1-3/s}$$

$$D = \frac{1}{3} \int \langle \vec{v}(t) \vec{v}(0) \rangle dt \quad D = D_0 \left( \frac{T}{T_0} \right)^{1/2+1/s}$$



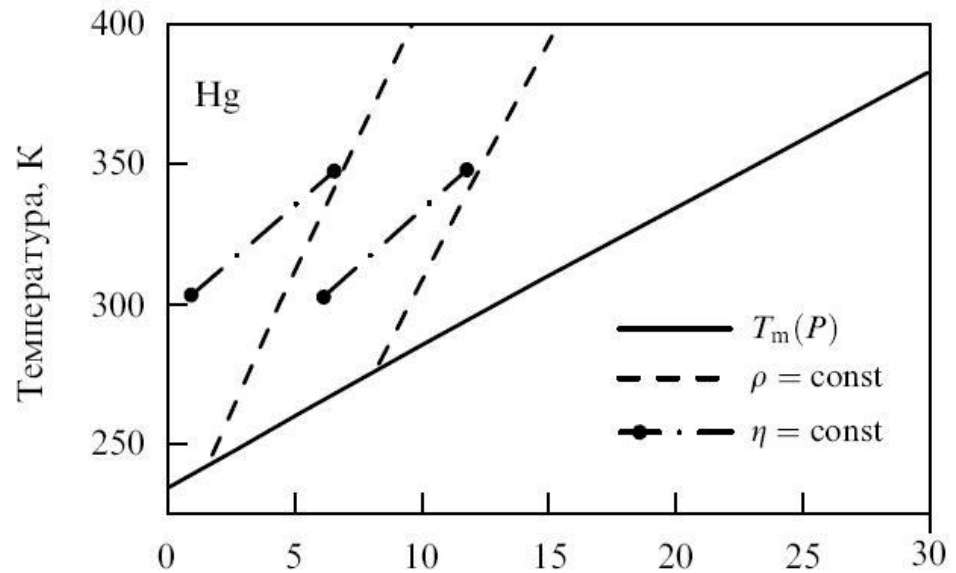
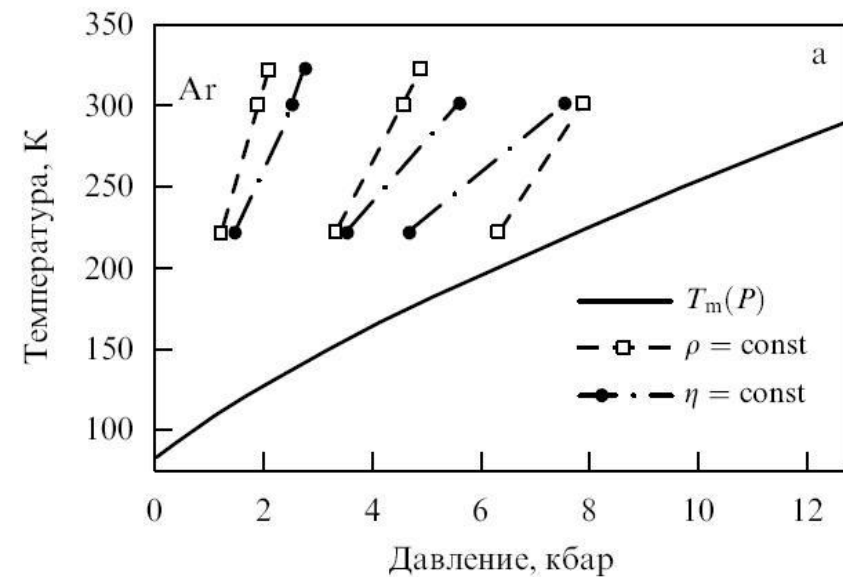
$$P \propto T^{\frac{5}{4}}$$

$$\eta \propto T^{\frac{2}{3}}$$

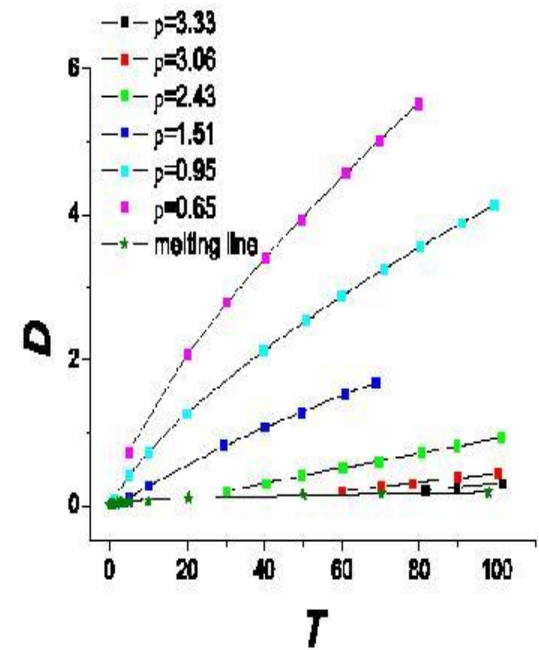
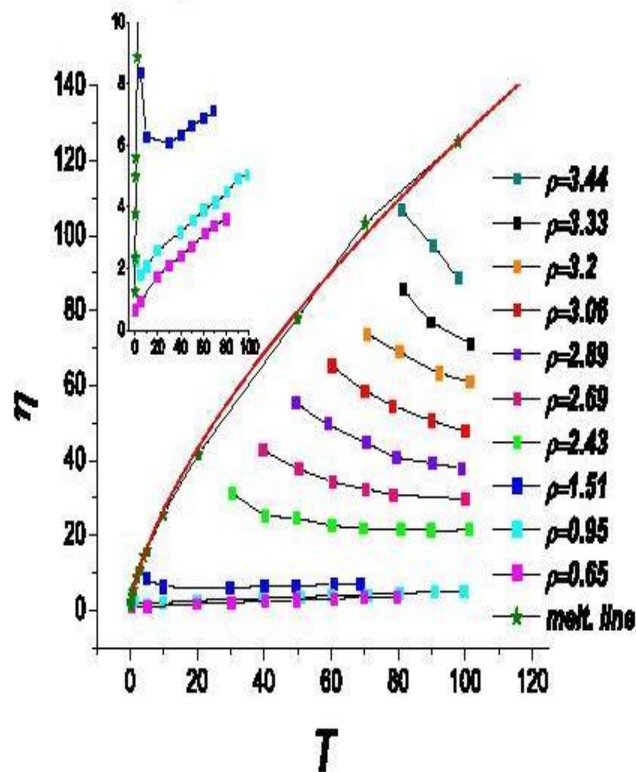
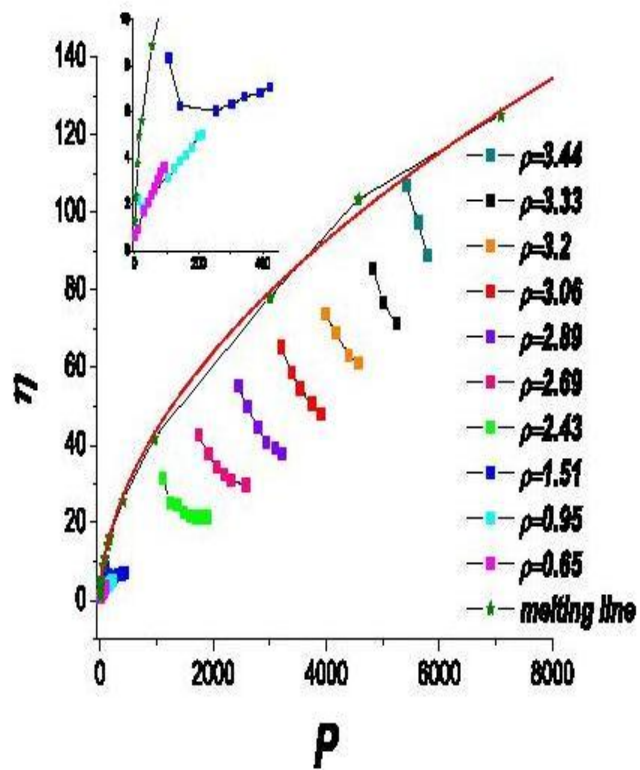
$$D \propto T^{\frac{5}{12}}$$

# Кривые постоянной вязкости

- Вязкость постоянна вдоль **изохор** (Bridgman)
- Вязкость постоянна вдоль **кривой плавления** (Poirier)



# Транспортные коэффициенты мягких сфер

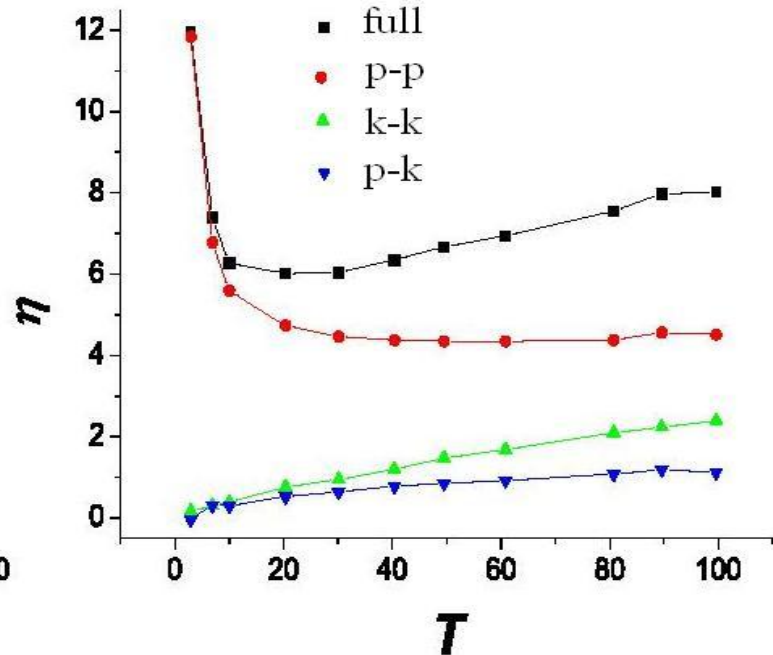
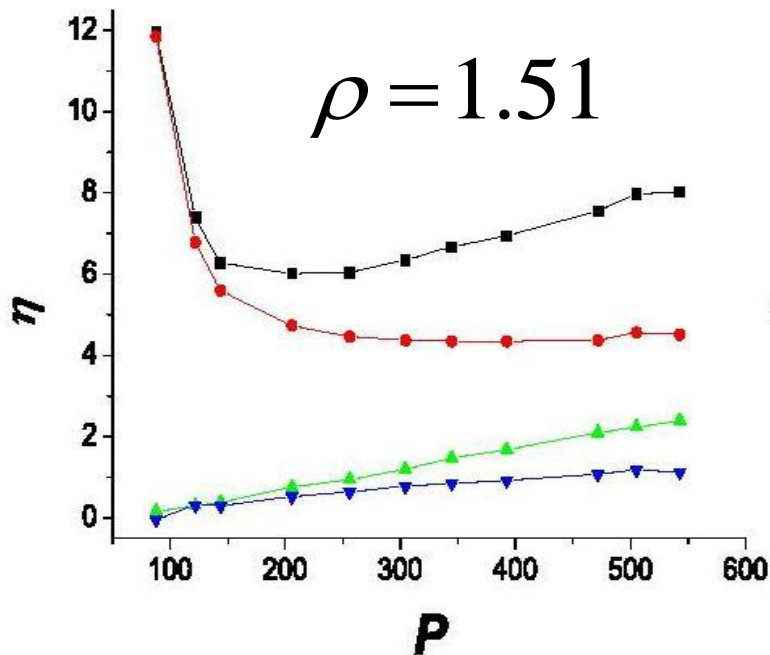


# Вязкость: различные вклады

$$\eta = \frac{1}{Vk_B T} \int_0^\infty \langle \sigma_{xy}(0) \cdot \sigma_{xy}(t) \rangle dt$$

$$\eta = \eta_{kk} + \eta_{pk} + \eta_{pp}$$

$$\sigma_{xy} = \sum_{i=1}^N \left[ m_i v_{x,i} v_{y,i} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} x_{ij} F(r_{ij}) \right] = \sigma_{xy}^k + \sigma_{xy}^p$$

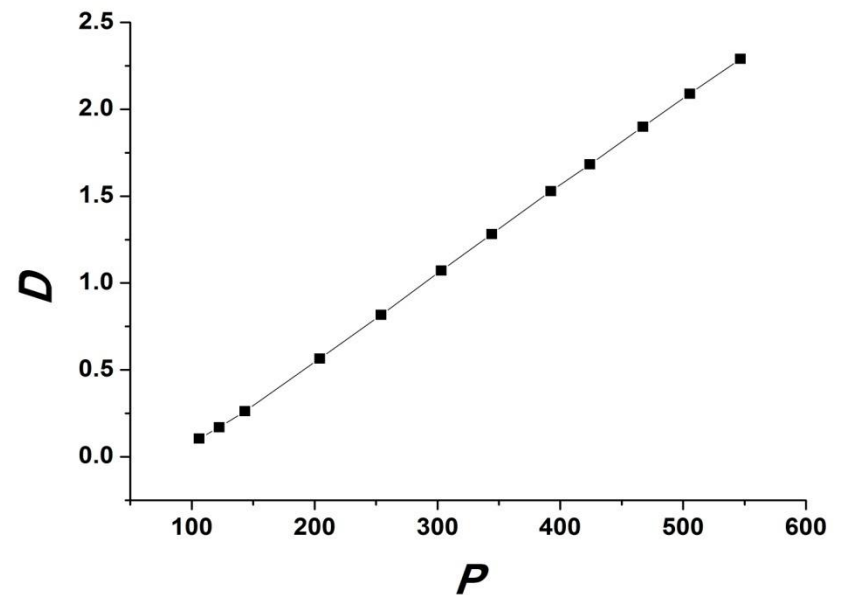
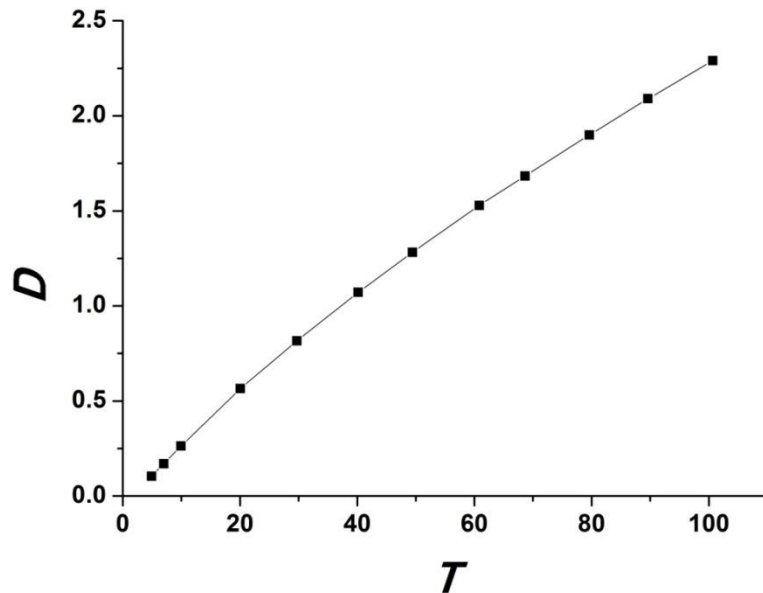


# Диффузия

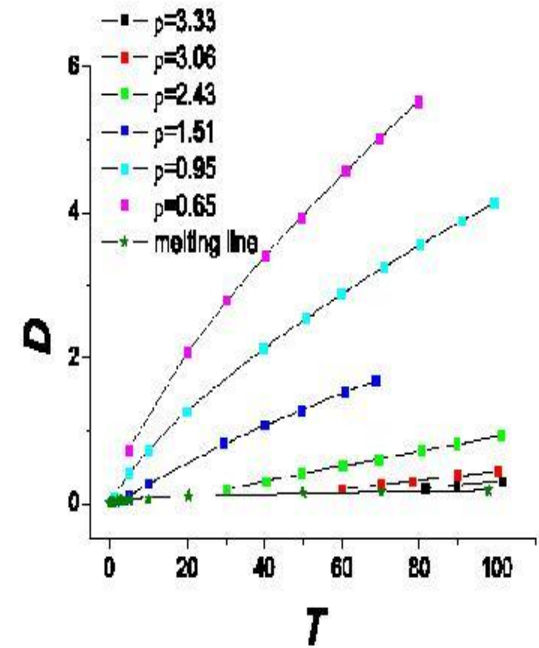
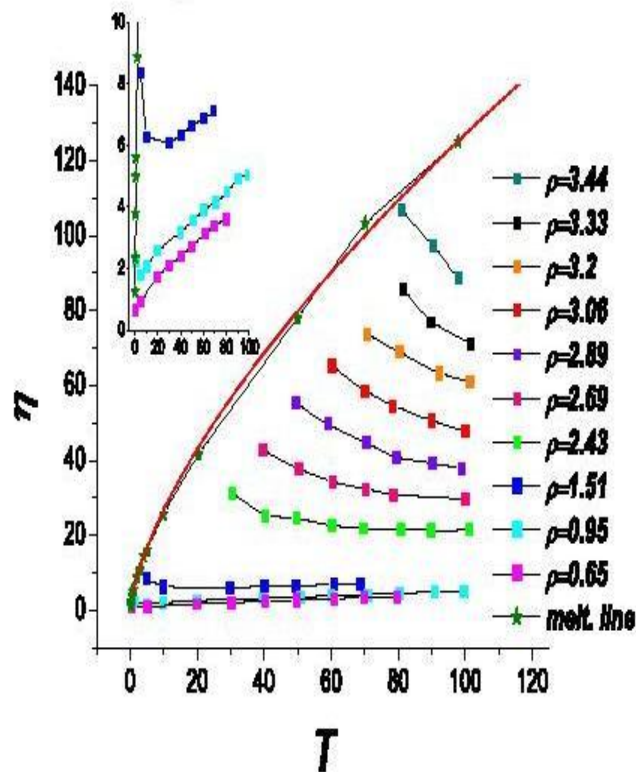
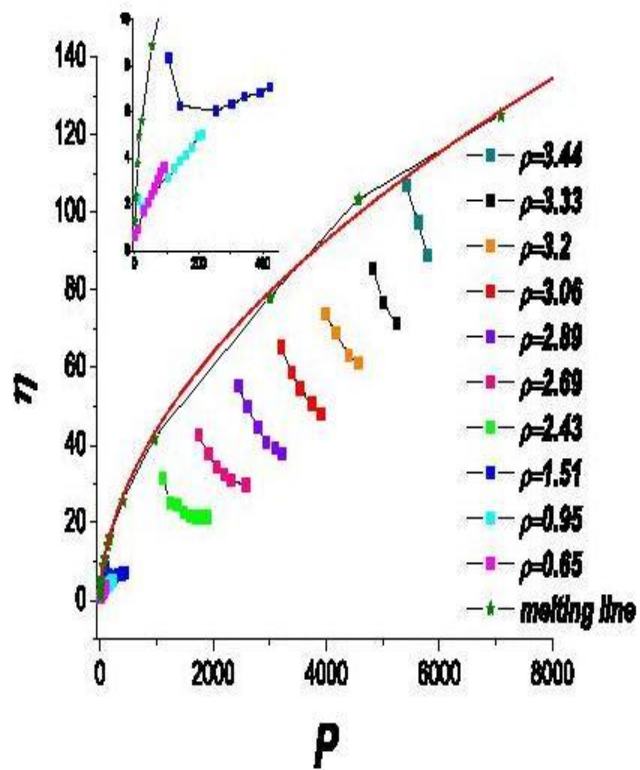
---

$$D = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \langle \vec{v}(t) \vec{v}(0) \rangle dt$$

$$\rho = 1.51$$

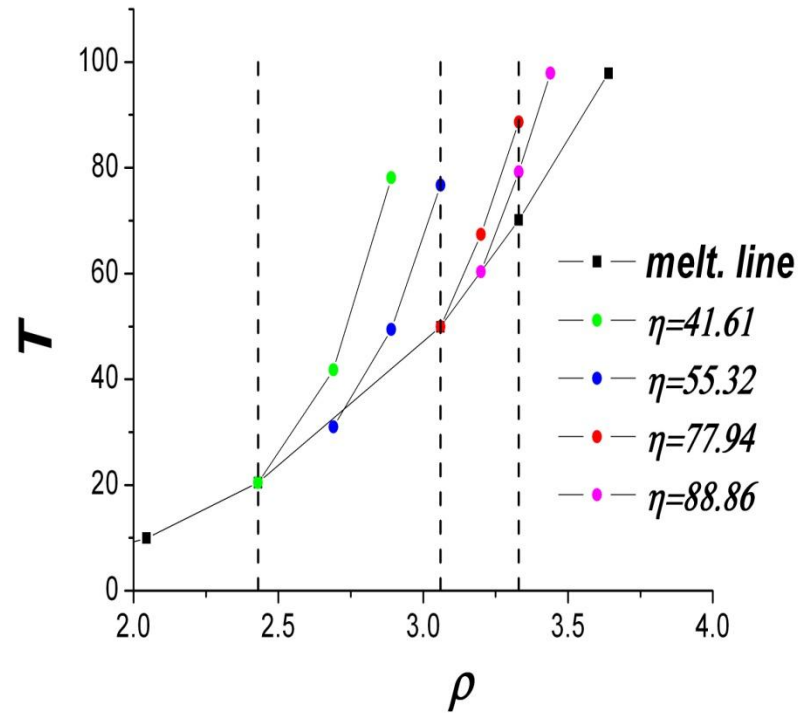
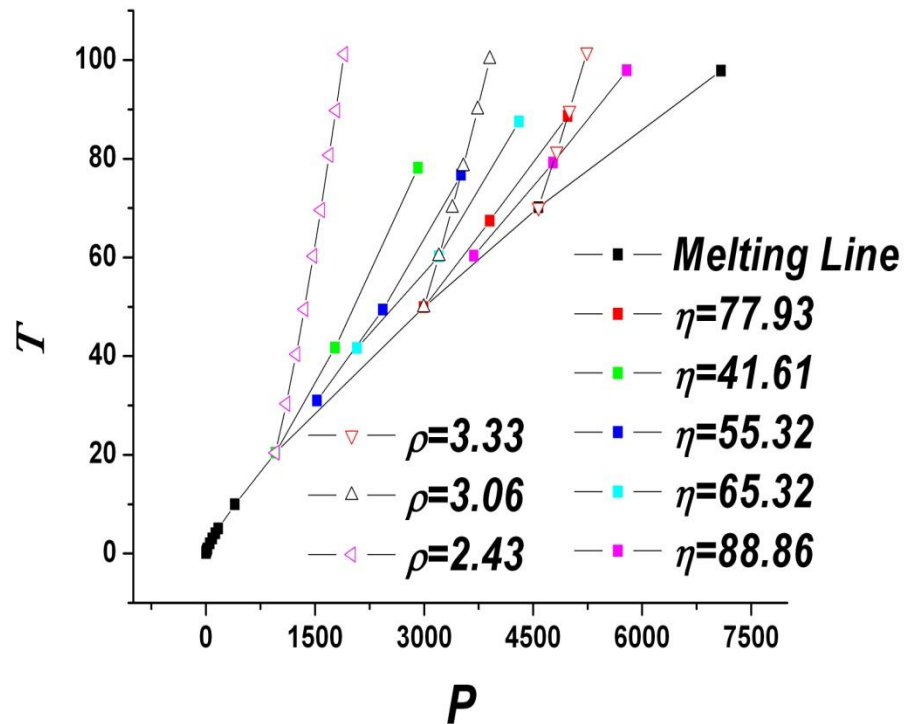


$D$  и  $\frac{1}{\eta}$  имеют качественно одинаковое поведение?





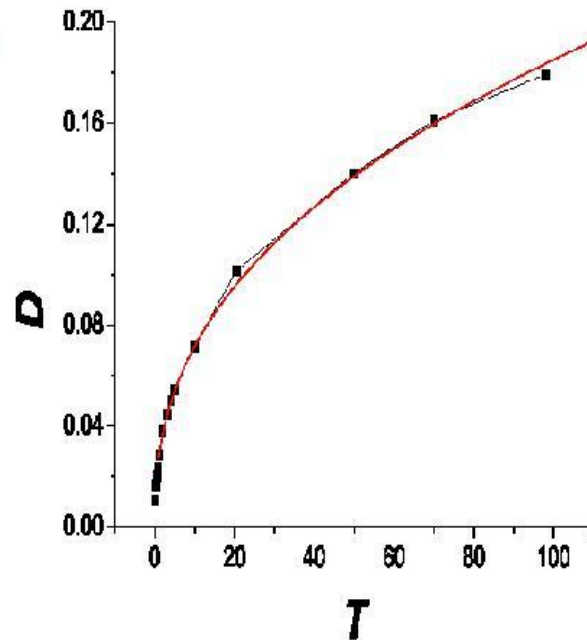
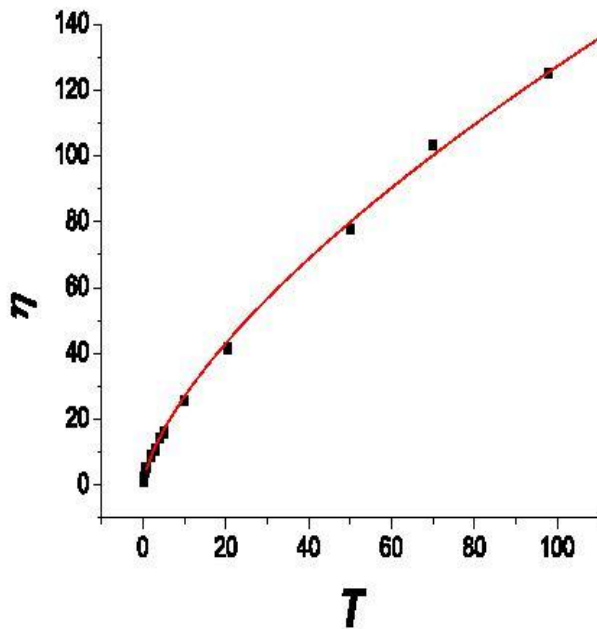
# Линии постоянной вязкости



# Переход в стекло

---

- Время релаксации  $\tau \approx 1000$  секунд
- Вязкость  $\eta \approx 10^{13}$  Пуаз



the glass or  
not the  
glass?

# Переход в стекло

---

- Время релаксации  $\tau \approx 1000$  секунд
- Вязкость  $\eta \approx 10^{13}$  Пуаз

$$\tau = \frac{\eta}{G_{\infty}}, \quad \text{где } G_{\infty} \text{ - модуль сдвига}$$

$$G_{\infty} \approx 10^{10} \text{ эрг/см}$$

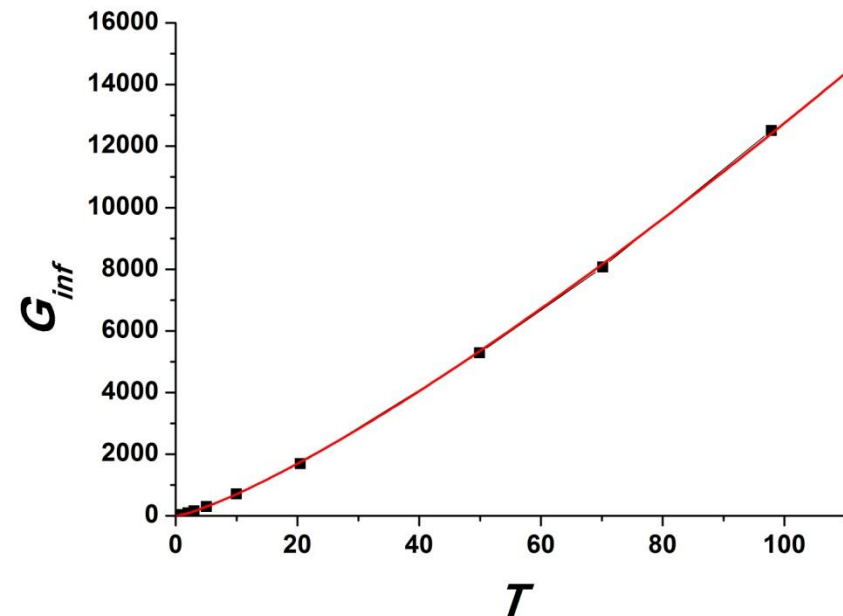
J.P. Hasnen, I.R. McDonald, Theory of Simple Liquids (2005)

---

# Модуль сдвига

---

$$G_{\infty} = \rho k_B T + \frac{2\pi\rho^2}{15} \int_0^{\infty} dr \cdot g(r) \frac{d}{dr} \left( r^4 \frac{dU(r)}{dr} \right)$$
$$G_{\infty} \propto T^{\frac{5}{4}}$$



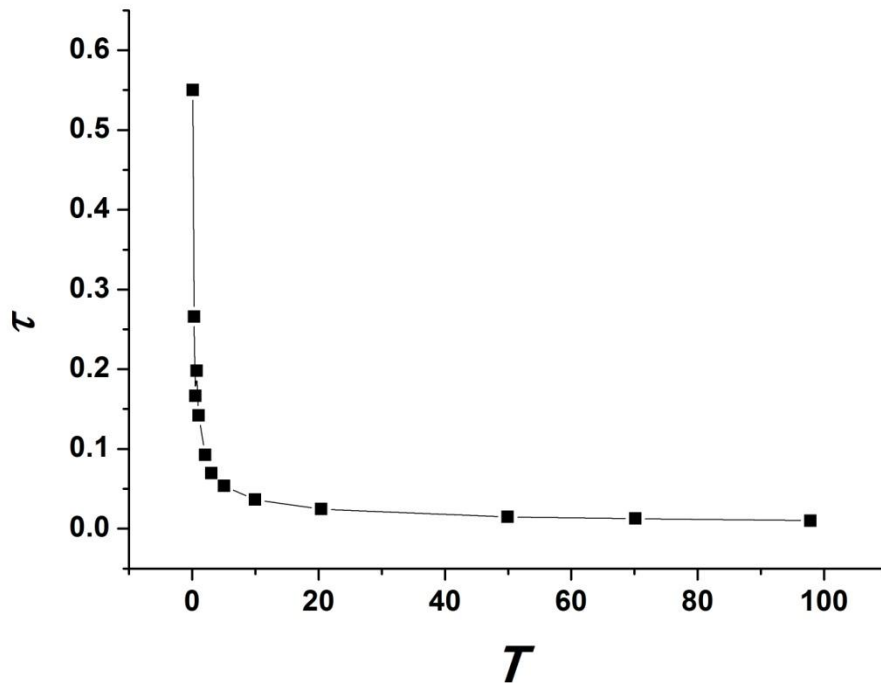
Быстрый рост вдоль кривой  
плавления

---

# Время релаксации

---

$$\tau = \frac{\eta}{G_{\infty}}, \quad G_{\infty} \propto T^{\frac{5}{4}}, \quad \eta \propto T^{\frac{2}{3}} \Rightarrow \tau \propto T^{-\frac{7}{15}}$$



# Выводы:

---

- Произведен расчет транспортных коэффициентов мягких сфер в большом интервале плотностей и температур;
  - Показано качественное различие в поведении вязкости и коэффициента диффузии и дано объяснение этому различию;
  - Построены кривые постоянной вязкости, которые качественно совпадают с экспериментальными данными для аргона и ртути;
  - Рассмотрена проблема стеклования мягких сфер вдоль кривой плавления.
-

# Система мягких сфер

---

$$U(r) = \varepsilon \left( \frac{\sigma}{r} \right)^n$$

$$s = r \left( \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

$$Z = \frac{V^N}{N \lambda^{3N}} \int_{s_1} \dots \int_{s_N} \exp \left[ -\beta \rho^{n/3} \sum_{i < j} s_{ij}^{-n} \right] ds_1 \dots ds_N,$$

$$\lambda = \left( \frac{\hbar}{2\pi m k_B T} \right)^{1/2} \quad \beta = 1/(k_B T).$$

$$U(\lambda r_1, \dots, \lambda r_N) = \lambda^n U(r_1, \dots, r_N)$$

$$\int_{r_1} \dots \int_{r_N} \exp[-\beta \cdot U(r_1, \dots, r_N)] dr_1 \dots dr_N = G(\beta \cdot \rho^{-n/3})$$

$$\gamma = \rho \sigma^3 \left( \frac{k_B T}{\varepsilon} \right)^{-\frac{3}{n}}$$

Термодинамические величины определяются параметром  $\gamma$ , а не плотностью и температурой

$$\gamma_{liq} = 1.15$$

$$\gamma_{sol} = 1.19$$

W. G. Hoover  
et al. J. Chem.  
Phys. **52**, 4931  
(1970)