

## ОБ АНОМАЛЬНОЙ ДИСПЕРСИИ ЗВУКА И СТРУКТУРЕ ЖИДКОСТИ

Д.А. Куц, А.Г. Воронцов

**В работе показано, что исчезновение аномальной дисперсии звука и изменение типа коллективного движения в жидкостях разной природы связано с изменением структуры жидкости.**

*Ключевые слова:* структура жидкости, скорость звука, численный эксперимент.

Исследования скорости звука в жидкостях обнаруживают присутствие аномальной (положительной) дисперсии звука [1–3], т.е. превышение скоростью звука гидродинамического значения при больших частотах. Эта особенность исчезает при понижении плотности, и распространение звука в жидкости становится сходным с таковым в газе. Исчезновение аномальной дисперсии наблюдается и в сверхкритической области температур, т.е. этот эффект не связан с критическими явлениями, поэтому представляется интересной попытка установить связь между изменением характера коллективного движения и изменениями, происходящими в структуре жидкости.

В работе были исследованы структуры различных компьютерных моделей: модели твердых сфер с параметром упаковки от 0,1 до 0,6; модели жидкости Леннард-Джонса (Л.-Дж.) для набора температур и плотностей; модели расплавов Cs, Rb, Hg для ряда температур, охватывающих весь диапазон существования жидкой фазы. Модели реальных систем (Cs, Rb, Hg) были получены по данным дифракционных экспериментов и описаны ранее [4, 5]. Для анализа моделей использовался метод Вороного-Делоне [6], заключающийся в разбиении пространства на простые геометрические фигуры с их последующим статистическим анализом.

Изменение характера коллективного движения происходит при достаточно низких плотностях, поэтому анализ изменений в структуре моделей производился в терминах межатомного пространства. Каждый симплекс Делоне относился к одному из 5 классов ( $n_0, n_1, \dots, n_4$ ) в соответствии с объемом и формой межатомного пространства в нем [7]. Симплексы  $n_0, n_1, n_2$  являются элементами плотных структур ( $n_0$  и  $n_1$  – близки к правильному тетраэдру, а симплексы  $n_2$  – к четвертинке октаэдра). Симплексы  $n_3$  и  $n_4$  являются фрагментами искаженных, рыхлых структур, они появляются в нагретых кристаллах и жидкостях [7]. По типу преобладающих в системе симплексов модели были разделены на три класса: I – модели с плотной структурой (плотная жидкость), II – модели со структурой с появляющимися границами между сгустками атомов (переходная область), III – модели с неоднородной структурой, состоящей из плотных и рыхлых фрагментов (рыхлая жидкость). Подробно методика разделение моделей на классы с различной структурой была описана ранее [7].

Во всех системах было обнаружено сходное изменение значений параметров  $n$  с уменьшением плотности и ростом температуры [4, 7]. При движении вдоль кривой равновесия жидкость–пар к критической точке области I, II и III последовательно сменяют друг друга. Различия проявлялись в положении областей I, II и III на фазовой диаграмме.

Для системы Л.-Дж. фазовая диаграмма (радиус обрезания потенциала  $2,5\sigma$ ) в координатах  $(\rho/\rho_c, T/T_c)$  с нанесенными на нее областями I, II и III приведена на рис. 1. Полученная информация о структуре была соотнесена с данными о нормальной и аномальной дисперсией звука для Ne, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> т.к. для этих веществ бинодаль совпадает с бинодалью системы Л.-Дж. в приведенных координатах.

Закрашенные знаки на рис. 1 соответствуют наличию в системе аномальной дисперсии звука. Можно заметить, что смена геометрии ближнего порядка непосредственно связана с изменением дисперсии. Сходные изменения происходят в расплавах металлов. На рис. 2 приведена фазовая диаграмма для Hg и отмечены области с различным ближним порядком. Аномальная дисперсия звука наблюдается в областях I и II [3]. В рубидии скорость звука исследовалась для температур 313–600 К, соответствующих плотной жидкости, и наблюдалась его аномальная дисперсия [2].

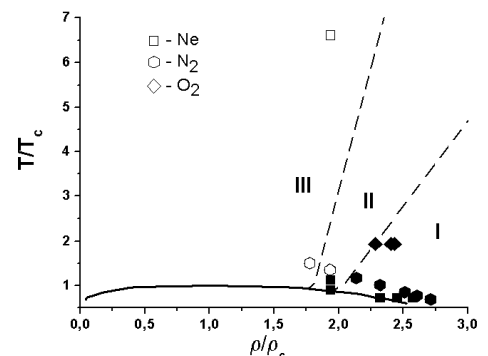


Рис. 1. Фазовая диаграмма системы Леннард-Джонса. Закрашенные знаки – аномальная дисперсия звука [1]

Присутствие и исчезновение аномальной дисперсии может быть объяснено изменением характера коллективного движения частиц. В жидкости при высоких плотностях у временной корреляционной функции скоростей (ВКФС) существует протяженная область отрицательных значений [8], что говорит о смене направления скорости частицы при столкновении с ее окружением. При низких плотностях ВКФС принимает только положительные значения, т.е. частица при соударении увлекает окружение в сторону своего движения. Это приводит к образованию тороидального вихря аналогичного гидродинамическому [9]. Методом МД моделирования было найдено, что для системы твердых сфер изменение характера коллективного движения происходит в окрестности плотности упаковки  $\approx 0,39$  [8]. Наши исследования показали, что в этой же окрестности ( $f \approx 0,35$ ) мы наблюдаем переход от плотной структуры жидкости (область I) к рыхлой (область III). Такая же особенность ВКФС присутствует в цезии при температуре около 1000 К [10], что соответствует обнаруженному нами изменению структуры [4].

Таким образом, можно говорить о том, что исчезновение аномальной дисперсии звука и изменение типа коллективного движения в жидкостях разной природы связано с изменением структуры жидкости и ее переходом от плотной жидкости к жидкости «рыхлой».

Работа поддержана РФФИ, проекты 06-03-32690, 06-08-01142.

### Литература

1. Gorelli, F. / F. Gorelli, M. Santoro, T. Scopigno // Phys. Rev. Lett. - 2006. - V. 97. - P. 245702.
2. Demmel, F. / F. Demmel, D. Pasqualini, C Morkel // Phys. Rev. B. - 2006. - V. 74. - P. 184207.
3. Ishikawa, D. / D. Ishikawa *et al.* // Phys. Rev. Lett. - 2004. - V. 93. - P. 097801.
4. Воронцов, А.Г. / А.Г. Воронцов, Д.А. Куц // Вестник ЮУрГУ. - 2005. - Вып. 6. - С. 77-84.
5. Vorontsov, A. / A. Vorontsov *et al.* // Journal of Physics: Conference Series. - 2008. - V. 98. - P. 012004.
6. Медведев, Н.Н. Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических систем. - Новосибирск: Изд-во СО РАН НИЦ ОИГГМ, 2000. - 214 с.
7. Воронцов, А.Г. / А.Г. Воронцов, Д.А. Куц // Расплавы. - 2008. - Вып. 3. - С. 83-92.
8. Alder B.J. / B.J. Alder *et al.* // J. Chem. Phys. - 1970. - V. 53. - №. 10. - P. 3813-3826.
9. Лагарьков А. / А. Лагарьков, В. Сергеев // УФН. - 1978. - Т. 125. - Вып. 3. - С. 409.
10. Albaki R. / R. Albaki *et al.* // J. Non-Cryst. Solids. - 2002. - V. 312-314. - P. 153-157.

Поступила в редакцию 19 сентября 2008 г.

## ON ANOMALOUS SOUND DISPERSION AND THE STRUCTURE OF LIQUID

It was shown that the disappearance of the anomalous sound dispersion and the change of collective dynamics in liquids are connected with the changes in the structure of liquid.

*Keywords: the structure of liquid, sound velocity, computer simulation.*

**Куц Дмитрий Анатольевич** - аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

**Kuts Dmitri Anatolevich** - Ph.D. student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

**Воронцов Александр Геннадьевич** - кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

**Vorontsov Alexander Gennadevich** - Cand.Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

e-mail: [sas@physics.susu.ac.ru](mailto:sas@physics.susu.ac.ru)

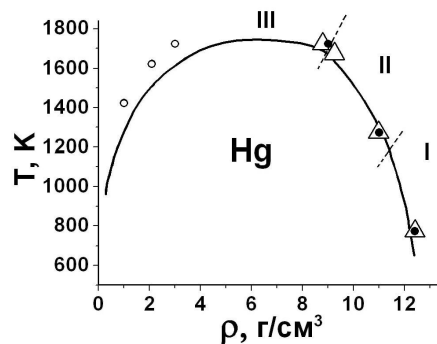


Рис. 2 Фазовая диаграмма ртути:  
 $\Delta$  – исследуемые модели,  
 $\circ$  – состояния, в которых исследовалась дисперсия звука [3],  
 $\bullet$  – аномальная дисперсия звука