Любовь Александровна Лунёва — канд. техн. наук, доцент кафедры физики МГТУ им. Н.Э. Баумана.

L.A. Lunyova — Ph. D. (Eng.), assoc. professor of “Physics” department of the Bauman Moscow State Technical University.

Константин Анатольевич Макаров — канд. техн. наук, доцент кафедры “Гидравлика и гидравлические машины” МГТУ им. Н.Э. Баумана.

K.A. Makarov — Ph. D. (Eng.), assoc. professor of “Hydraulics” department of the Bauman Moscow State Technical University.

УДК 534-14+536.711

Е. С. Баланкина

ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ НЕЛИНЕЙНОСТИ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРКУСА–ЙЕВИКА

С использованием уравнения состояния, полученного из решения уравнения Перкуса–Йевика для модели твердых сфер, выведены зависимости параметров нелинейности второго и третьего порядков от плотности упаковки. Получено общее уравнение для оценки акустического параметра нелинейности третьего порядка исходя из параметра нелинейности второго порядка и его зависимостей от температуры и давления. Для ряда органических жидкостей и сжиженных газов по полученным зависимостям рассчитаны значения акустических параметров нелинейности и установлено, что они находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными.

Ключевые слова: нелинейная акустика, уравнение Перкуса–Йевика, модель твердых сфер, параметры нелинейности, плотность упаковки.

Описание межмолекулярных взаимодействий исходя из значений адиабатической или изотермической сжимаемости — это линейное приближение. Межмолекулярные взаимодействия сильно нелинейны относительно расстояния между взаимодействующими атомами или атомными группами, поэтому в настоящее время интенсивно исследуются закономерности распространения звуковых волн конечной амплитуды в жидкостях и растворах в целях выявления природы отклонений межмолекулярных взаимодействий от линейного закона. То есть в современной акустике центр исследований смещается в область нелинейной акустики, поскольку линейная акустика — это лишь результат линеаризации точных уравнений, а нелинейная акустика позволяет получать более точное их решение. Параметры нелинейности второго (B/A) и третьего (C/A) порядков представляют собой постоянные величины для рассматриваемой среды и являются ее акустическими характеристиками наравне со скоростью звука, затуханием, рассеянием; их определение представляет интерес для ряда областей науки —

подводной акустики, медицины и др. За последнее десятилетие значительный прогресс достигнут в изучении параметра нелинейности второго порядка B/A [1–11]. В большинстве работ B/A вычисляют в рамках термодинамического метода на основании исследования зависимостей $P-T-u$ (давление–температура–скорость звука) [3]. Наиболее значимый результат исследований параметра B/A заключается в том, что его значения сильно зависят от структуры и состава среды [1, 9–11]. Существенно слабее по сравнению с параметром B/A изучен параметр нелинейности третьего порядка C/A. Коппенс с соавторами [2] вывел выражение для расчета C/A, исходя из параметра B/A и второй производной скорости по давлению при постоянной энтропии. Хагельберг показал [4], что в случае воды слагаемое со второй производной скорости по давлению при постоянной энтропии может быть заменено на эту же производную при постоянной температуре. Однако интерес представляет изучение параметров B/A и C/A с точки зрения теории жидкости.

В рамках статистической теории жидкости основная задача о вычислении статистической суммы решается косвенно через вычисление радиальной функции распределения (РФР), которая для простых жидкостей одновременно описывает их структуру и термодинамические свойства. Экспериментальными методами, позволяющими получить необходимую информацию о РФР, являются рентгенография и нейтронография. К теоретическим методам относят метод интегральных уравнений (из которых чаще других применяют нелинейное уравнение Перкуса–Йевика), а также метод машинного моделирования. Если воспользоваться потенциалом твердых сфер, то уравнение Перкуса–Йевика можно решить аналитически и получить уравнение состояния жидкости. В работе [5] приведен теоретический расчет C/A исходя из уравнения Ван-дер-Ваальса и оценены его значения для ряда органических жидкостей. В [6] дана оценка параметра B/A на основании исследования решения уравнения Перкуса–Йевика в рамках модели твердых сфер для случая, когда параметр Грюнайзена γ равен единице, а в работе [7] параметр B/A оценен на основе уравнения состояния Карнахана–Старлинга при допущении $\gamma = \text{const}$, когда производные γ по температуре при постоянном давлении и по давлению при постоянной температуре равны нулю, что существенно сужает круг жидкостей, к которым применима данная оценка.

Целью настоящей работы является, во-первых, оценка параметров нелинейности B/A и C/A на основании исследования решения уравнения Перкуса–Йевика в модели твердых сфер для общего случая, в том числе когда $\gamma \neq 1$, а $(\partial\gamma/\partial P)_T \neq 0$, $(\partial\gamma\partial T)_P \neq 0$; во-вторых, определение параметра C/A исходя из анализа изменений параметра B/A как функции температуры и давления.

Определение параметров нелинейности $\boldsymbol{B/A}$ и $\boldsymbol{C/A}$ жидкостей в рамках термодинамического метода. В общем случае уравнение состояния жидкости неизвестно. В нелинейной акустике часто предполагается, что это уравнение можно представить в виде $P = P(\rho, s)$, где P — давление, ρ — плотность, s — энтропия. Разлагая P в ряд Тейлора по малым отклонениям плотности от равновесного значения ρ_0 при $s =$ const и малым отклонениям энтропии от равновесного значения s_0 при $\rho =$ const, имеем

$$P = P_0 + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{s,0}(\rho - \rho_0) + \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_{s,0}\frac{(\rho-\rho_0)^2}{2!} + \\ + \left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3}\right)_{s,0}\frac{(\rho-\rho_0)^3}{3!} + \ldots + \left(\frac{\partial P}{\partial s}\right)_{\rho,0}(s - s_0) + \\ + \left(\frac{\partial^2 P}{\partial s^2}\right)_{\rho,0}\frac{(s-s_0)^2}{2!} + ... + \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho \partial s}\right)(s-s_0)(\rho-\rho_0) + \ldots$$

Так как распространение звука по существу есть адиабатический процесс, можно положить $s = s_0$ и адиабатическое уравнение состояния примет вид

$$P = P_0 + A\left(\frac{\rho-\rho_0}{\rho_0}\right) + \frac{B}{2!}\left(\frac{\rho-\rho_0}{\rho_0}\right)^2 + \frac{C}{3!}\left(\frac{\rho-\rho_0}{\rho_0}\right)^3 + \ldots, \qquad (1)$$

где $A = \rho_0\left(\partial P/\partial \rho\right)_{s,0} = \rho_0 u_0^2$; $B = \rho_0^2\left(\partial^2 P/\partial \rho^2\right)_{s,0}$; $C = \rho_0^3\left(\partial^3 P/\partial \rho^3\right)_{s,0}$; u_0 — скорость звука бесконечно малой амплитуды. Все частные производные взяты при постоянной энтропии и равновесной конфигурации (это обозначают нижними индексами “s” и “0” соответственно). Уравнение (1) представляет тот факт, что плотность зависит нелинейно от давления. Параметр нелинейности B/A берется согласно Байеру [8] как отношение первого нелинейного коэффициента B к линейному коэффициенту A в уравнении (1):

$$\frac{B}{A} = 2\rho_0 u_0\left(\frac{\partial u}{\partial P}\right)_{s,0}.$$

В термодинамическом методе величина параметра B/A может быть рассчитана по измерениям изменения скорости звука при изменении температуры и давления [2]:

$$\frac{B}{A} = 2\rho_0 u_0\left(\left(\frac{\partial u}{\partial P}\right)_{T,0} + \frac{\gamma-1}{\alpha_p}\beta_s\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_{P,0}\right), \qquad (2)$$

где β_s — адиабатический коэффициент сжимаемости; α_p — коэффициент теплового расширения. Учитывая связь между адиабатическим и изотермическим (β_T) коэффициентами сжимаемости и уравнение Лапласа $u^2 = 1\rho\beta_s$, преобразуем выражение (2) к виду

$$\frac{B}{A} = -1 - \frac{1}{\beta_{s_0}}\left(\frac{\partial \ln \beta_T}{\partial P}\right)_{T,0} - \\ - \frac{\gamma - 1}{\alpha_{p_0}}\left(\frac{\partial \ln \beta_T}{\partial T}\right)_{P,0} + \frac{1}{\beta_{s_0}}\left(\frac{\partial \ln \gamma}{\partial P}\right)_{T,0} + \frac{\gamma - 1}{\alpha_{p_0}}\left(\frac{\partial \ln \gamma}{\partial T}\right)_{P,0}.$$

Параметр Грюнайзена можно представить в виде $\gamma = \dfrac{\alpha_P V}{C_V \beta_T}$ (C_V — теплоемкость при постоянном объеме), производные от логарифма γ по давлению и температуре преобразуются к виду

$$\left(\frac{\partial \ln \gamma}{\partial P}\right)_{T,0} = -q\beta_{T_0} \quad \text{и} \quad \left(\frac{\partial \ln \gamma}{\partial T}\right)_{P,0} = q\alpha_{P_0},$$

где $q = 1 + \dfrac{1}{\beta_T}\left(\dfrac{\partial \ln \beta_T}{\partial P}\right)_{T,0} + \dfrac{1}{\alpha_{P_0}}\left(\dfrac{\partial \ln \beta_T}{\partial T}\right)_{P,0} + \dfrac{1}{\beta_{T_0}}\left(\dfrac{\partial \ln C_V}{\partial P}\right)_{T,0}$.
Тогда выражение для параметра B/A можно переписать так:

$$\frac{B}{A} = -1 - \frac{1}{\beta_{s_0}}\left(\frac{\partial \ln \beta_T}{\partial P}\right)_{T,0} - \frac{\gamma - 1}{\alpha_{p_0}}\left(\frac{\partial \ln \beta_T}{\partial T}\right)_{P,0} - q, \tag{3}$$

Параметр нелинейности третьего порядка C/A вычисляется как отношение второго нелинейного коэффициента C к линейному коэффициенту A в уравнении (1):

$$\frac{C}{A} = \frac{\rho_0^2}{u_0^2}\left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3}\right)_{s,0}$$

Используя термодинамические соотношения, Коппенс [2] получил формулу для расчета C/A:

$$\frac{C}{A} = \frac{3}{2}\left(\frac{B}{A}\right)^2 + 2\rho_0^2 u_0^3\left(\frac{\partial^2 u}{\partial P^2}\right)_{s,0}. \tag{4}$$

Вторую производную скорости по давлению при постоянной энтропии в выражении (4) можно преобразовать следующим образом:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial P^2}\right)_{s,0} = \left(\frac{\partial}{\partial P} u \left(\frac{\partial \ln u}{\partial P}\right)_{s,0}\right)_{s,0} = \frac{B/A}{4\rho_0^2 u_0^3} + u\left(\frac{\partial^2 \ln u}{\partial P}\right)_{s,0},$$

тогда выражение (4) принимает вид

$$\frac{C}{A} = 2\left(\frac{B}{A}\right)^2 - \frac{1}{\beta_{s_0}^2}\left\{\left(\frac{\partial^2 \ln \rho}{\partial P^2}\right)_{s,0} + \left(\frac{\partial^2 \ln \beta_s}{\partial P^2}\right)_{s,0}\right\} \tag{5}$$

Учитывая, что вторую производную логарифма коэффициента адиабатической сжимаемости при постоянной энтропии можно представить как $\left(\dfrac{\partial^2 \ln \beta_s}{\partial P^2}\right)_{s,0} = -\left[\left(\dfrac{B}{A}+1\right)\left(\dfrac{\partial \beta_s}{\partial P}\right)_{s,0} + \beta_s \left(\dfrac{\partial B/A}{\partial P}\right)_{s,0}\right]$, а $\dfrac{1}{\beta_{s_0}}\left(\dfrac{\partial \ln \beta_s}{\partial P}\right) = -\dfrac{B}{A} - 1$, выражение (5) преобразуем к виду

$$\frac{C}{A} = \left(\frac{B}{A}\right)^2 - \frac{B}{A} + \frac{1}{\beta_{s_0}}\left(\frac{\partial B/A}{\partial P}\right)_{s,0}.$$

Учитывая, что $\left(\dfrac{\partial B/A}{\partial P}\right)_{s,0} = \left(\dfrac{\partial B/A}{\partial P}\right)_{T,0} + \left(\dfrac{\partial T}{\partial P}\right)_{s,0}\left(\dfrac{\partial B/A}{\partial T}\right)_{P,0}$, где $\left(\dfrac{\partial T}{\partial P}\right)_{s,0} = \dfrac{\gamma - 1}{\alpha_{p0}}\beta_{s_0}$, получаем окончательное выражение для расчета параметра нелинейности третьего порядка C/A через значения параметра нелинейности второго порядка B/A и его первые производные по давлению и температуре:

$$\frac{C}{A} = \left(\frac{B}{A}\right)^2 - \frac{B}{A} + \frac{\gamma}{\beta_{T_0}}\left(\frac{\partial B/A}{\partial P}\right)_{T,0} + \frac{\gamma - 1}{\alpha_{p0}}\left(\frac{\partial B/A}{\partial T}\right)_{P,0}. \qquad (6)$$

Оценка параметров B/A и C/A в модели твердых сфер и обсуждение результатов. Наиболее успешно структура и термодинамические свойства жидкостей описываются с помощью уравнения Перкуса–Йевика. Известно его аналитическое решение для модели твердых сфер [12, 13]:

$$PV = N_A k_B T \frac{1 + Y + Y^2}{(1 - Y)^3},$$

где k_B — постоянная Больцмана; N_A — число Авогадро; V — объем системы; $Y = \pi d^* D^3/6$ — плотность упаковки шаров диаметром D; $d^* = N_A/V$. Это уравнение состояния дает очень хорошее качественное описание вплоть до высоких значений плотностей упаковки и определяет сжимаемость с высокой точностью для значений плотностей упаковки вплоть до $Y = 0{,}47$ [14].

Для оценки параметра B/A исходя из уравнения (3) необходимо взять производные по давлению и температуре от коэффициента изотермической сжимаемости, который в рамках модели твердых сфер имеет вид [15]

$$\beta_T = \frac{1}{d^* k_B T}\frac{(1 - Y)^4}{(1 + 2Y)^2}. \qquad (7)$$

Дифференцируя выражение (7) по давлению при постоянной температуре и по температуре при постоянном давлении, соответственно имеем

$$\left(\frac{\partial \ln \beta_T}{\partial P}\right)_{T,0} = -\beta_{T_0}\left(1+4Y\left(\frac{1}{1-Y}+\frac{1}{1+2Y}\right)\right); \qquad (8)$$

$$\left(\frac{\partial \ln \beta_T}{\partial T}\right)_{P,0} = \alpha_{P_0}\left(1-\frac{1}{\alpha_{P_0}T}+4Y\left(\frac{1}{1-Y}+\frac{1}{1+2Y}\right)\right). \qquad (9)$$

Поскольку последнее слагаемое в формуле для q, входящего в выражение (3), можно преобразовать, используя термодинамические соотношения, к виду

$$\frac{1}{\beta_{T_0}}\left(\frac{\partial \ln C_V}{\partial P}\right)_{T,0} = -(\gamma-1)\left\{\frac{1}{\alpha_{P_0}}\left(\frac{\partial \ln \alpha_p}{\partial T}\right)_{P,0} - \frac{2}{\alpha_{P_0}}\left(\frac{\partial \ln \beta_T}{\partial T}\right)_{P,0}\right\} + \\ + (\gamma-1)\frac{1}{\beta_{T_0}}\left(\frac{\partial \ln \beta_T}{\partial P}\right)_{T,0},$$

то необходимо найти также производную коэффициента теплового расширения по температуре:

$$\left(\frac{\partial \ln \alpha_P}{\partial T}\right)_{P,0} = \alpha_{P_0}\left(-\frac{1}{\alpha_{P_0}T}+4Y\left(\frac{3Y^2}{4\left(1-Y^3\right)}+\frac{1}{1+2Y}\right)\right). \qquad (10)$$

Подставляя полученные выражения (8)–(10) в уравнение (3), получаем выражение для параметра нелинейности второго порядка

$$\frac{B}{A} = 4Y\left(\frac{1}{1-Y}+\frac{1}{1+2Y}+\frac{\left(1+Y/2\right)^2}{1-Y^3}\right)+(\gamma-1)\frac{\left(1+2Y\right)^2}{1-Y^3}. \qquad (11)$$

Из формулы (11) следует, что с увеличением плотности упаковки растет значение параметра B/A. Такое качественное поведение подтверждается экспериментально в гомологических рядах как неассоциированных жидкостей (например, н-алканов [10]), так и ассоциированных жидкостей, таких как н-спирты [11].

Для оценки параметра нелинейности третьего порядка согласно ранее полученному выражению (6) необходимо взять производные по давлению и температуре от выражения (11):

$$\left(\frac{\partial B/A}{\partial P}\right)_T = \\ = 4Y\beta_T\left[\frac{1}{\left(1-Y\right)^2}+\frac{1}{\left(1+2Y\right)^2}+\left(1+\frac{Y}{2}\right)\frac{1+(3/2)\,Y+2Y^3}{\left(1-Y^3\right)^2}\right]+ \\ + \frac{1}{\alpha_P T}\left(\frac{\partial\gamma}{\partial P}\right)_T+\frac{\gamma-1}{\alpha_P T}\frac{\beta_T}{\alpha_P}\left(\frac{\partial \ln \beta_T}{\partial T}\right)_P; \qquad (12)$$

$$\left(\frac{\partial B/A}{\partial T}\right)_P =$$
$$= -4Y\alpha_P\left[\frac{1}{(1-Y)^2}+\frac{1}{(1+2Y)^2}+\left(1+\frac{Y}{2}\right)\frac{1+(3/2)\,Y+2Y^3}{(1-Y^3)^2}\right]+$$
$$+\frac{1}{\alpha_P T}\left(\frac{\partial\gamma}{\partial T}\right)_P-\frac{\gamma-1}{\alpha_P T}\left[\left(\frac{\partial\ln\alpha_P}{\partial T}\right)_P-\frac{1}{T}\right]. \quad (13)$$

Подставляя (9), (10), (12), (13) в выражение (6) с учетом соотношений $\left(\frac{\partial\ln\gamma}{\partial P}\right)_{T,0} = -q\beta_{T_0}$ и $\left(\frac{\partial\ln\gamma}{\partial T}\right)_{P,0} = q\alpha_{P_0}$, получаем формулу для параметра нелинейности третьего порядка:

$$\frac{C}{A}=\left(\frac{B}{A}\right)^2-\frac{B}{A}+$$
$$+4Y\left(\frac{1}{(1-Y)^2}+\frac{1}{(1+2Y)^2}+2\left(1+\frac{Y}{2}\right)\frac{1+Y+Y^3}{1-Y^3}\right)+$$
$$+4Y(\gamma-1)\frac{(1+2Y)^2}{1-Y^3}\left\{\frac{1}{1-Y}+\frac{1}{1+2Y}-\right.$$
$$\left.-(\gamma-1)\left(\frac{3Y^2}{4(1-Y^3)}+\frac{1}{1+2Y}\right)\right\}. \quad (14)$$

По формулам (11) и (14) рассчитаны параметры нелинейности второго и третьего порядков в зависимости от значений плотности упаковки при $\gamma = 1{,}0$; $\gamma = 1{,}2$; $\gamma = 1{,}3$, которые приведены в табл. 1. В качестве нижнего предела плотности упаковки в табл. 1 взято значение для жидкости с наиболее ажурной структурой — водой; верхний предел соответствует плотной случайной упаковке невзаимодействующих твердых шаров ($Y = 0{,}6366 \pm 0{,}0004$ [16]). Для органических жидкостей значение параметра $\gamma = 1\ldots1{,}4$. Известно, что экспериментальные значения параметра B/A жидкостей лежат в пределах от 5 до 14, что согласуется с данными табл. 1. Также из табл. 1 видно, что с увеличением плотности упаковки растет разница значений параметров нелинейности второго и третьего порядков, рассчитанных при различных значениях γ, причем эта зависимость гораздо сильнее сказывается на значениях параметра C/A, чем B/A. Из сравнения значений параметра B/A при различных γ следует, что вплоть до плотности упаковки 0,51 различием значений параметра B/A можно пренебречь в пределах точности его оценки.

В табл. 2 представлены результаты расчета для ряда органических жидкостей и сжиженных газов, молекулы которых можно аппроксимировать сферами. Значения коэффициентов упаковки, рассчитанные из уравнения сжимаемости (7) в модели твердых сфер, взяты из работ

Таблица 1

Зависимости от плотности упаковки Y параметров нелинейности второго (B/A) и третьего (C/A) порядков, вычисленных по формулам (11) и (14) при различных γ

	B/A			C/A		
Y	$\gamma = 1$	$\gamma = 1{,}2$	$\gamma = 1{,}3$	$\gamma = 1$	$\gamma = 1{,}2$	$\gamma = 1{,}3$
0,36	5,2	5,8	6,1	31	39	43
0,37	5,4	6,0	6,4	33	42	46
0,38	5,6	6,3	6,6	36	45	50
0,39	5,8	6,5	6,8	38	48	53
0,40	6,0	6,7	7,1	41	52	57
0,41	6,2	7,0	7,3	44	55	61
0,42	6,5	7,2	7,6	47	59	66
0,43	6,7	7,5	7,8	51	64	70
0,44	6,9	7,7	8,1	55	68	75
0,45	7,2	8,0	8,4	59	73	81
0,46	7,5	8,3	8,7	63	78	86
0,47	7,7	8,6	9,0	67	84	92
0,48	8,0	8,9	9,3	72	90	99
0,49	8,3	9,2	9,6	77	96	106
0,50	8,6	9,5	9,9	83	103	113
0,51	8,9	9,8	10,3	89	110	121
0,52	9,2	10,2	10,7	95	118	130
0,53	9,5	10,5	11,0	102	126	139
0,54	9,9	10,9	11,4	109	135	149
0,55	10,2	11,3	11,8	117	145	160
0,56	10,6	11,7	12,2	126	155	171
0,57	11,0	12,1	12,7	135	167	184
0,58	11,4	12,6	13,1	145	179	197
0,59	11,8	13,0	13,6	156	193	212
0,60	12,3	13,5	14,1	168	207	228
0,61	12,8	14,0	14,6	181	223	245
0,62	13,2	14,5	15,2	195	240	264
0,63	13,7	15,1	15,8	211	257	284
0,64	14,3	15,7	16,4	227	279	307

[15, 17]. Видно, что с увеличением плотности упаковки в гомологическом ряду н-алканов растут значения параметров нелинейности, что количественно согласуется с экспериментальными данными [10]. Следует отметить, что, несмотря на присутстви в воде направленных связей (Н-связи), молекула воды хорошо аппроксимируется сферой и рассчитанные значения параметров нелинейности для H_2O находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными (см. табл. 2).

Таблица 2

Параметры нелинейности жидкостей, рассчитанные по формулам (11) (B/A) и (14) (C/A), и экспериментальные значения $(B/A)_э$, $(C/A)_э$

Жидкость	T, K	Y	B/A	$(B/A)_э$	C/A	$(C/A)_э$
н-C_5H_{12}	293	0,417*1	7,85	7,41*4	70	58*4
н-C_6H_{14}	293	0,447*1	8,26	–	78	–
н-C_7H_{16}	293	0,471*1	8,96	9,19*4	92	85*4/138,1*3
н-C_8H_{18}	293	0,491*1	9,42	9,37*4	101	91*4
н-C_9H_{20}	293	0,509*1	9,88	9,52*4	111	79*4
C_6H_6	293	0,433*1	8,40	9,03*5	81	89,99*3
C_7H_8	293	0,461*1	9,24	–	98	–
Ar	85,2	0,374*2	5,94	5,01 (86 K)	55	–
N_2	74	0,463*2	7,05	7,78 (75 K)	64	–
H_2	17	0,305*2	6,04	6,87	41	–
O_2	80	0,472*2	7,77	–	68	–
H_2O	298	0,359*2	5,25	5,11*5	32	32*5

П р и м е ч а н и е. *1 — работа [17], *2 — [15], *3 — [5], *4 — [10], *5 — [2], экспериментальные значения $(B/A)_э$ для сжиженных газов взяты из работы [18]

Выводы. 1. Предложено выражение для расчета параметра нелинейности третьего порядка C/A исходя из величины параметра B/A и его первых производных по температуре и давлению.

2. На основе решения уравнения Перкуса–Йевика в рамках модели твердых сфер получено выражение для расчета параметров нелинейности второго и третьего порядков для любых значений γ по его зависимости от температуры и давления и показано, что учет отличия γ от единицы вносит значительный вклад в значение параметра C/A, а его вкладом в значение параметра B/A можно пренебречь при плотностях упаковки, меньших 0,51.

3. Рассчитанные значения параметров нелинейности второго и третьего порядков в рамках модели твердых сфер для ряда органических жидкостей и сжиженных газов находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Л и с н я н с к и й Л. И., М и х а й л о в Э. Г., Э ш а н о в С. Э. О связи структуры водных растворов третичного бутилового спирта с коэффициентом нелинейности // Акустический журнал. – 1974. – Т. XX, № 1. – С. 67–70.
2. P a r a m e t e r nonlinearity in fluids II / A.B. Coppens, R.T. Beyer, M.B. Seiden, et. al. // J. Acoust. Soc. Am. – 1965. – V. 38, no. 5. – P. 797–804.

3. B j o r n o L., B l a c k K. High order acoustic nonlinearity parameters of fluids. Nonlinear deformation waves / U. Nigul, J. Engelbrecht (Eds). Berlin: Springer–Verlag, 1983. – P. 355–360.
4. H a g e l b e r g M. P., H o l t o n G., K ao S. Calculation of B/A for water from measurements of ultrasonic velocity verses temperature and pressure to 10000 // J. Acoust. Soc. Am. – 1967. – V. 41. – P. 158–162.
5. X u X., M a o F., C o n g X., Z h a n g D. Theoretical calculations and experimental study on the third order nonlinearity parameter C/A for organic liquids and biological fluids // J. Acoust. Soc. Am. – 2003. – V. 113, no. 3. – P. 1743.
6. E n d o H. Prediction of the nonlinearity parameter of a liquids from Percus-Yevick equation // J. Acoust. Soc. Am. – 1988. – V. 83, no. 6. – P. 2043.
7. P a n d e y J. D., M i s h r a R. K., V e r m a R. Evaluation of the acoustic nonlinearity parameter of a liquid using hard sphere equation of state // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2005. – V. 38. – P. 135–137.
8. B e y e r R. T. Parameter nonlinearity in fluids // J. Acoust. Soc. Am. – 1960. – V. 32. – P. 719–721.
9. Б а л а н к и н а Е. С., Л я щ е н к о А. К. О структурной специфике концентрационного изменения скорости звука в водных растворах электролитов // Журнал структурной химии. – 2001. – Т. 47, № 1. – С. 62–68.
10. H a r t m a n n B., B a l i z e r E. Calculated B/A parameters for n-alkane liquids // J. Acoust. Soc. Am. – 1987. – V. 82, no. 2. – P. 614–620.
11. B a n c h e t J., C h e e k e J. D. N. Measurement of the acoustic nonlinearity parameter B/A in solvents: Dependence on chain length and sound velocity // J. Acoust. Soc. Am. – 2000. – V. 108, no. 6. – P. 2754–2758.
12. W e r t h e i m M. S. Exact solution of the Percus–Yevick integral equation for hard sphere // Phys. Rev. Lett. – 1963. – V. 10, no. 8. – P. 321.
13. T h i e l e E. Equation state for hard sphere // J. Chem. Phys. – 1963. – V. 39, no. 2. – P. 474–479.
14. Б а л е с к у Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. – М.: Мир, 1978. – 404 с.
15. G o p a l a R a o R. V., J o a r d a r R. N. An equation of state of square-well fluids & Evaluation of some thermodynamic properties // Indian J. Pure Appl. Phys. – 1976. – V. 14. – P. 905–908.
16. B e r r y m a n J. G. Random close packing of hard spheres and disks // Physical Review A. – 1983. – V. 27, no. 2. – P. 1053–1061.
17. K o d a k o M. Correlation between molecular size and packing density of solvents // J. Phys. Chem. B. – 2004. – V. 108. – P. 1160–1164.
18. S w a m y K. M., N a r a y a n a K. L., S w a m y P. S. A study of B/A in liquefied gases as a function of temperature and pressure from ultrasonic velocity measurements // Acustica. – 1975. – V. 32. – P. 339–341.

Статья поступила в редакцию 19.06.2008

Елена Сергеевна Баланкина родилась в 1964 г., окончила Московский инженерно-физический институт в 1987 г. Канд. физ.-мат. наук, доцент Московского государственного университета приборостроения и информатики (МГУПИ). Автор 59 научных работ в области термодинамики конденсированного состояния, теории масштабной частицы (SPT), моделирования смесей сыпучей средой и корреляционного анализа “структура–свойство” (QSPR).

Ye.S. Balankina (b. 1954) graduated from the Moscow Engineering and Physical Institute in 1987. Ph. D. (Phys.-Math.), assoc. professor of the Moscow State University for Instrument Engineering and Information Technology. Author of 59 publications in the field of thermodynamics of condensed state, theory of paticles (SPT), simulation of mixture by particulate medium, and correlation analysis of “structure–property” (QSPR).