

Линия Френкеля и положительная дисперсия звука в жидкости.

Е. А. Гайдук^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН

Жидкость представляет собой промежуточное состояние вещества между твердотельным и газообразным. При нормальных условиях легко определить, в каком из этих состояний находится то или иное вещество. Ситуация меняется, если перевести вещество в область давлений и температур выше критических. В этих условиях жидкое и газообразное состояния неотличимы друг от друга и, как следствие, объединены под одним термином – флюид. Однако такое объединение довольно условно, так как свойства флюида меняются в зависимости от температуры и давления, поэтому было предложено разделить флюид по динамическим характеристикам на жесткий (или жидкоподобный) и мягкий (или газоподобный). Линию, разделяющую флюид на две части, назвали линией Френкеля [1, 2].

Для построения линии Френкеля было исследовано несколько модельных систем частиц, в частности система частиц, взаимодействующих между собой посредством потенциала с двумя характерными длинами [3]. Эта система частиц является предметом исследования в данной работе. Особенность такого потенциала взаимодействия в том, что в системе в зависимости от плотности возможны две локальные структуры – большие сферы при низкой плотности и малые сферы – при высокой. Результатом этого является нетривиальная фазовая диаграмма системы, а также наличие водоподобных аномалий структуры, диффузии и плотности в жидкости в области средних плотностей, где происходит плавный переход от одной локальной структуры к другой [4].

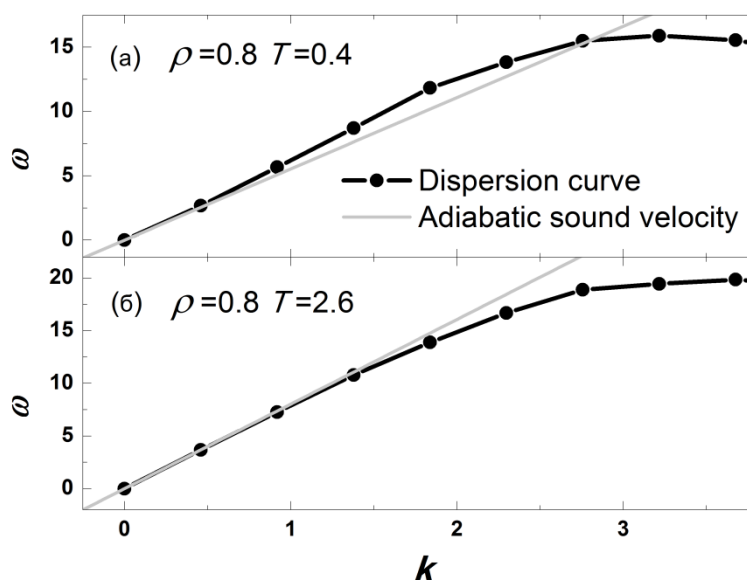
Одним из ключевых отличий в свойствах жидкоподобного флюида от газоподобного является наличие в нем сдвиговой жесткости при достаточно высоких частотах. Это означает, что в таком флюиде возможно распространение поперечных возбуждений при высоких частотах. Для доказательства этого было решено исследовать эффект положительной дисперсии звука (PSD – positive sound dispersion) в этой системе. PSD-эффект заключается в том, что в определенном диапазоне значений волновых векторов дисперсионная кривая превосходит адиабатическую скорость звука за счет вклада поперечных мод в общий спектр системы (рис. 1а, 1б) [1, 5].

PSD-эффект был исследован в этой системе в широком диапазоне температур и плотностей. По полученным данным была построена линия Френкеля (рис. 2). При низких и средних плотностях линия распалась на две ветви, что отражает конкуренцию двух локальных структур в этой области. В целом, итоговый результат согласуется с

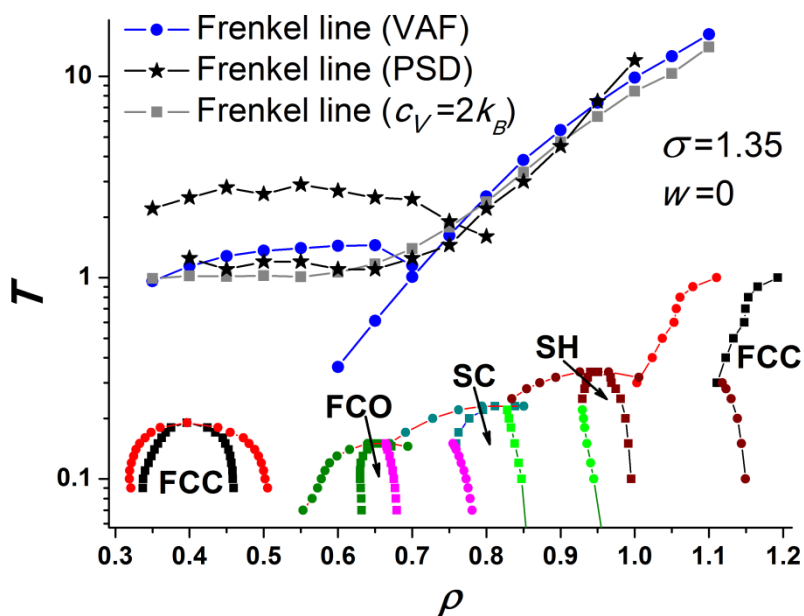
полученными ранее линиями, построенными по другим критериям (автокорреляционной функции скорости (VAF) и теплоемкости $c_V = 2k_B$).

В недавних экспериментах положительная дисперсия звука была обнаружена в расплавах металлов. Это доказывает, что поперечные возбуждения могут распространяться и в обычных жидкостях, а не только в сверхвязких, как считалось ранее. Таким образом, линия Френкеля может быть принята в качестве универсальной линии, разделяющей флюид на жидкоподобную и газоподобную части [6].

Работа поддержана грантом Российского научного фонда №14-22-00093.



«Рис. 1а, 1б. Пример наличия и отсутствия положительной дисперсии звука в системе».



«Рис. 2. Линия Френкеля, построенная по трем различным критериям, на фазовой диаграмме».

Литература

1. *Brazhkin V.V. [et al.]* “Liquid-Gas” Transition in the Supercritical Region: Fundamental Changes in the Particle Dynamics. – *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – Vol. 111. – 145901.
2. *Brazhkin V.V. [et al.]* Two liquid states of matter: A dynamic line on a phase diagram. – *Phys. Rev. E.* – 2012. – Vol. 85. – 031203.
3. *Fomin Yu.D., [et al.]* Complex phase behavior of the system of particles with smooth potential with repulsive shoulder and attractive well. – *J. Chem. Phys.* – 2011. – Vol. 134. – 044523.
4. *Fomin Yu.D., [et al.]* Inversion of sequence of diffusion and density anomalies in core-softened systems. – *J. Chem. Phys.* – 2011. – Vol. 135. – 234502.
5. *Bryk T. [et al.]* Collective excitations in soft-sphere fluids. – *Phys. Rev. E.* – 2014. – Vol. 90. – 042301.
6. *Fomin Yu.D., [et al.]* Dynamical crossover line in supercritical water. – *Sci. Rep.* – 2015. – Vol. 5, 14234; doi: 10.1038/srep14234.