

УДК 541.64:539.199

## КЛЕТОЧНЫЙ ЭФФЕКТ И ЛИНИЯ ФРЕНКЕЛЯ НА ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ

Пестряев Е.М.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет  
450062, г. Уфа, ул. Космонавтов, д. 1  
e-mail: physics\_usptu@mail.ru*

Методом молекулярной динамики исследованы коэффициенты самодиффузии (КСД) и времена жизни –  $\tau$ -частиц леннард-джонсовской жидкости в первой координационной сфере (ПКС) своих соседей для коэффициентов упаковки системы  $\phi$  от 0.1 до 0.8. Оказалось, что распределение  $\tau$  характеризуется широким пиком в области коротких времен, простирающимся на несколько десятичных порядков. Показано, что использование координационного числа  $Z$  в качестве аргумента исследованных характеристик наглядно демонстрирует процесс возникновения и развития клеточного эффекта. Наблюдаемая зависимость КСД от  $\phi$  описывается одной из последних теорий самодиффузии [1], исключая газообразное состояние системы, для которых уравнение и не предназначалось. Интервал  $Z$ , в котором начинается и заканчивается конденсация системы ( $5 \div 7$ ) совпадает с его теоретическим значением [2], необходимым для замыкания клетки. Окончание процесса замыкания клетки приводит к возможности распространения в среде высокочастотных поперечных звуковых волн и, согласно определению [3,4], переводит жидкость из «мягкого» состояния в «твердое», характеризующееся сдвиговой вязкостью. Положение этого перехода на фазовой диаграмме при изменении термодинамических параметров образует непрерывную кривую, обнаруженную недавно в экспериментах и названную линией Френкеля [3,4], который ввел в теорию жидкостей понятие клеточного эффекта [5,6].

### Литература

1. Bretonnet J.-L. Journal of Chemical Physics, 2002. V. 117, № 20. P. 9370-9373.
2. Peters E.A.J.F. et al. Physical Review E, 2001. V. 63, № 2. P. 021404(8).
3. Brazhkin V.V. et al. Physical Review E, 2012. V. 85, № 3. P. 031203(3).
4. Бражкин В.В. и др. Успехи физических наук, 2012. Т. 182, № 11. С. 1137-1156.
5. Frenkel J. Zeitschrift für Physik, 1926. V. 35, № 8. P. 652-669.
6. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. Л: Наука, 1975. 442 с.