

А.М. Макашева, Л.А. Бекбаева*

Карагандинский технический университет, Караганда, Казахстан

*e-mail: lyazzat.bekbaeva@mail.ru

КЛАСТЕРНО-АССОЦИАТНАЯ МОДЕЛЬ ВЯЗКОСТИ СПЛАВА СВИНЕЦ-ОЛОВО В СОПОСТАВЛЕНИИ С МОДЕЛЮ ФРЕНКЕЛЯ-АНДРАДЕ

Аннотация. Статья посвящена разработке обобщенной кластерно-ассоциатной модели динамической вязкости сплава свинец-олово, основанной на концепции хаотизированных частиц и ее взаимосвязи с моделью вязкости Френкеля-Андраде.

Помимо практической важности, изучение вязкости расплавов неорганических соединений представляет и большой научный интерес, так как вязкость является наиболее структурно-чувствительной характеристикой вещества, дающей представление о силах межмолекулярного взаимодействия и о механизме процессов молекулярного переноса в жидкостях. Накопление знаний в этой области позволяет решить многие вопросы, связанные с теорией жидкого состояния.

Экспериментальный материал по вязкости расплавов неорганических соединений довольно ограничен, что объясняется серьезными трудностями, связанными с проведением соответствующих исследований. Поэтому предлагается для изучения вязкости использование кластерно-ассоциатной модели, что значительно приближает к решению многих задач связанных с теорией жидкости. Модель вязкости Френкеля-Андраде позволяет оценить энергию активации текучести. Расчеты показывают, что при сопоставлении этой энергии со степенью ассоциации кластеров, получаемой в рамках кластерно-ассоциатной модели, наблюдается достаточно тесная линейная корреляция. При этом коэффициент пропорциональности имеет смысл энергии активации, приходящейся на один кластер. Эта энергия не выходит за пределы ван-дер-ваальсовой энергии ненасыщенной межмолекулярной связи, характерной для взаимодействия частиц в жидкости.

Ключевые слова: концепция хаотизированных частиц, распределение Больцмана, динамическая вязкость, сплав свинец-олово, кластер, ассоциат.

Введение. Вязкость является важнейшей характеристикой жидкого состояния вещества. Как известно, теория жидкого состояния вещества еще разработана не так однозначно, как теории твердого и газообразного состояний. Для жидкого состояния имеется множество физических и математических моделей, особенно для расплавов.

Анализ литературных источников [1-11] показал, что природа вязкого состояния недостаточно изучена, имеется разрозненность температурных зависимостей вязкости, фрагментарность и узость экспериментального определения этой характеристики и невозможность ее отображения в полном температурном диапазоне жидкого состояния, особенно для расплавов. Этим и определяется актуальность данных исследований, в частности сложных соединений.

На основе распределения Больцмана и нормированной зависимости частиц от температуры авторами [12, 13] разработана полуэмпирическая кластерно-ассоциатная модель вязкого течения жидкости, позволяющая оценить агрегации кластеров в ассоциаты. Сопоставление с моделью вязкости Френкеля-Андраде позволяет по энергии активации вязкого течения и степени ассоциации кластеров определить единицу течения.

Методика расчета. Согласно этой концепции, в соответствии с фундаментальным распределением Больцмана вязкое течение рассматривается как разрушение ассоциатов путем преодоления сил ван-дер-ваальсового притяжения между кластерами, что в принципе не противоречит существующим представлениям о вязком течении и подчиняется новой зависимости [14, 15]:

$$\eta = \eta_1 (T_1/T)^a, \quad (1)$$

где η_1 – реперная экспериментальная (справочная) точка динамической вязкости при температуре T_1 (К); a – степень ассоциации кластеров (среднее число частиц в кластере). Для вычисления показателя a необходимо иметь вторую реперную точку η_2, T_2

$$a = a_2(T_2/T)b, \quad (2)$$

где b – степень агрегации ассоциаций кластеров. Для идентификации показателя b используется третья реперная точка η_3, T_3

$$a_2 = \frac{\ln(\eta_2/\eta_1)}{\ln(T_1/T_2)}, \quad (3)$$

$$a_3 = \frac{\ln(\eta_3/\eta_1)}{\ln(T_1/T_3)}, \quad (4)$$

$$b = \frac{\ln(a_3/a_2)}{\ln(T_2/T_3)}. \quad (5)$$

Таким образом, общая форма двухуровневой иерархической модели будет представлена следующим образом:

$$\eta = \eta_1 (T_1/T)^{a_2(T_2/T)^b}. \quad (6)$$

При этом уравнение (6) можно определить как обобщённое полуэмпирическое, поскольку, сохраняя причастность к фундаментальному распределению Больцмана, в нём используются реперные значения (при T_1, T_2 и T_3).

Реперные точки целесообразно выбирать соответственно в начале, середине и в конце всего имеющегося экспериментального массива η_i, T_i . В этом случае можно ограничиться расчетом a_2, a_3 и b , не обрабатывая весь экспериментальный массив, с дальнейшим введением необходимых величин в модель (6) и вычислением η для сопоставления со всеми экспериментальными значениями по коэффициенту корреляции. Проверим приведенные выкладки на примере сплава свинец-олово.

Результаты расчетов и их обсуждение. Сплав олова со свинцом обладает особыми характеристиками. Они изменяются после добавки легирующих компонентов. Сплав свинец-олово активно применяется в металлургии для предохранения других металлов от коррозии в реакционных средах [17, 18].

Сводка данных по динамической вязкости сплава свинец-олово приведена в справочнике [16], из которой выбраны в качестве реперных точек: $T_m = 456$ К [19], $T_1 = 510$ К, $\eta_1 = 2$ мПа·с, $T_2 = 600$ К, $\eta_2 = 1,6$ мПа·с, $T_3 = 660$ К, $\eta_3 = 1,5$ мПа·с (для Pb с молярной долей 0); $T_1 = 480$ К, $\eta_1 = 3$ мПа·с, $T_2 = 575$ К, $\eta_2 = 2,1$ мПа·с, $T_3 = 725$ К, $\eta_3 = 1,8$ мПа·с (для Pb – 0,3); $T_1 = 612,5$ К, $\eta_1 = 2,8$ мПа·с, $T_2 = 675$ К, $\eta_2 = 2,2$ мПа·с, $T_3 = 775$ К, $\eta_3 = 1,9$ мПа·с (для Pb с молярной долей 1). По этим точкам с помощью формул (3)-(5) рассчитаны значения: $a_2 = 1,3730$; $a_3 = 1,1158$; $b = 2,1767$ (для Pb – 0); $a_2 = 1,9751$; $a_3 = 1,2387$; $b = 2,0128$ (для Pb с молярной долей 0,3); $a_2 = 2,4820$; $a_3 = 1,6479$; $b = 2,9648$ (для Pb с молярной долей 1). Подставляя найденные значения в формулу (6) расчетные зависимости примут следующий вид:

$$\eta = 2(510/T)^{1,3730(600/T)^{2,1767}}, \text{ мПа}\cdot\text{с}, \quad (7)$$

$$\eta = 3(480/T)^{1,9751}(575/T)^{2,0128}, \text{ мПа}\cdot\text{с}, \quad (8)$$

$$\eta = 2,8(612,5/T)^{2,4820}(675/T)^{2,9648}, \text{ мПа}\cdot\text{с}. \quad (9)$$

Сопоставление всех данных приведено в таблице 1, на рисунке 1 изображены графики.

Таблица 1. Динамическая вязкость сплава свинец-олово по [16] и по зависимостям (7), (8), (9)

T, К	Молярная доля Рв								
	0			0,3			1		
	η [16], мПа·с	η (7), мПа·с	a	η [16], мПа·с	η (8), мПа·с	a	η [16], мПа·с	η (9), мПа·с	a
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$T_m=456$	–	2,644	2,495	–	3,526	3,150	–	29,149	7,940
460	–	2,575	2,448	–	3,422	3,095	–	25,661	7,737
470	–	2,420	2,336	5	3,193	2,964	–	19,144	7,259
475	–	2,352	2,283	–	3,093	2,901	–	16,746	7,035
480	–	2,290	2,232	3	3,000	2,841	–	14,762	6,820
500	–	2,083	2,042	2,5	2,696	2,617	–	9,544	6,043
505	2,6	2,040	1,998	–	2,634	2,565	–	8,687	5,867
510	2	2,000	1,956	–	2,576	2,515	–	7,950	5,698
520	–	1,928	1,875	–	2,472	2,418	–	6,755	5,379
525	–	1,896	1,836	2,2	2,426	2,372	–	6,269	5,229
540	1,8	1,812	1,727	–	2,304	2,241	–	5,132	4,810
550	–	1,764	1,659	2,2	2,236	2,160	–	4,572	4,555
560	1,7	1,723	1,596	–	2,176	2,083	–	4,123	4,318
575	–	1,669	1,506	2,1	2,100	1,975	–	3,603	3,993
580	1,6	1,654	1,478	–	2,078	1,941	–	3,462	3,891
600	1,6	1,600	1,373	2	2,002	1,813	3	3,011	3,519
612,5	–	1,573	1,313	–	1,963	1,739	2,8	2,800	3,311
620	1,5	1,558	1,278	–	1,943	1,697	–	2,693	3,193
625	–	1,549	1,256	2	1,931	1,670	2,6	2,629	3,118
637,5	–	1,529	1,203	–	1,903	1,605	2,5	2,489	2,940
640	1,5	1,525	1,193	–	1,898	1,592	–	2,464	2,906
650	–	1,512	1,153	2	1,879	1,543	2,4	2,374	2,776
660	1,5	1,500	1,116	–	1,863	1,497	–	2,297	2,653
675	–	1,485	1,063	1,9	1,842	1,430	2,2	2,200	2,482
700	–	1,466	0,982	1,8	1,817	1,329	2,2	2,079	2,228
725	–	1,452	0,909	1,8	1,800	1,239	2	1,996	2,008
750	–	1,444	0,845	–	1,790	1,157	1,9	1,938	1,816
775	–	1,439	0,787	–	1,786	1,083	1,9	1,900	1,648

Коэффициенты нелинейной множественной корреляции следующие:

– по справочным данным [16] и по уравнению (7): $R = 0,979734$ и его значимость $t_R = 59,814 \gg 2$,

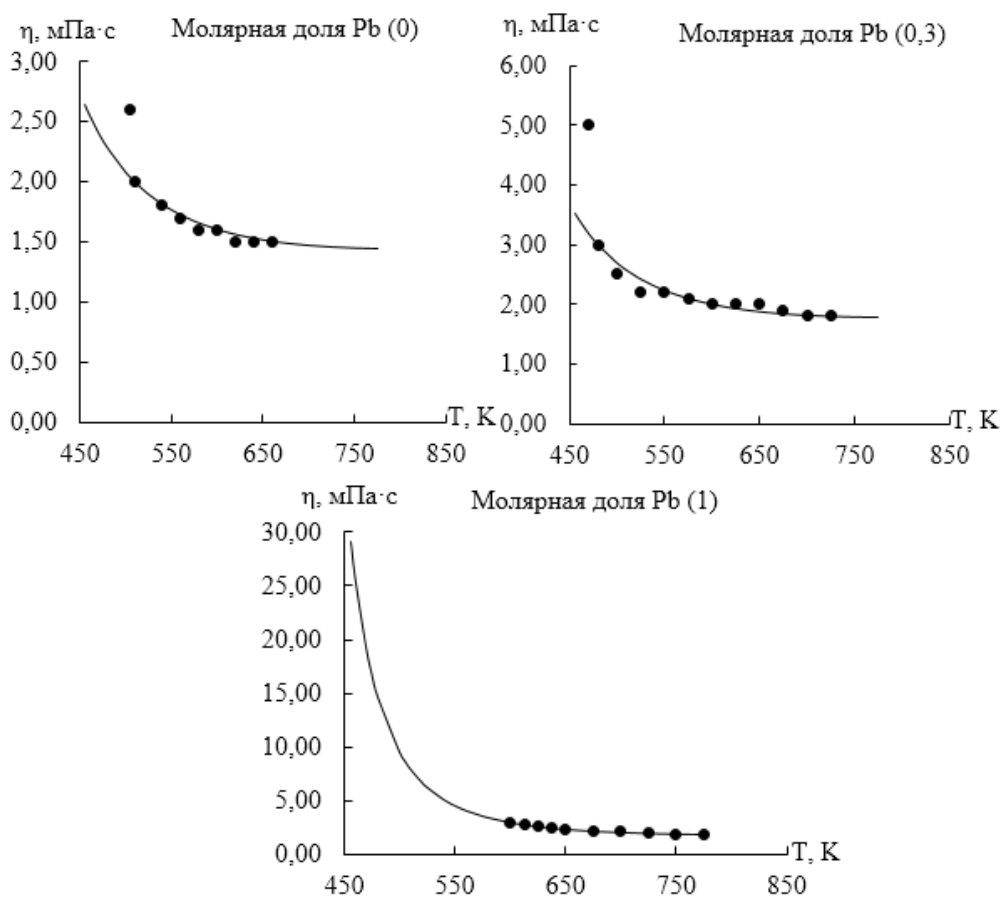
– по справочным данным [16] и по уравнению (8): $R = 0,758241$ и $t_R = 5,641 \gg 2$,

– по справочным данным [16] и по уравнению (9): $R = 0,992189$ и его значимость $t_R = 180,339 \gg 2$, что указывает на точность и функциональность новых моделей вязкости.

Выберем реперные точки для определения вязкости по Френкелю по модели

$$\eta = 2(\eta_0 e)^{E/RT} \quad (10)$$

$T_1 = 510$ К, $\eta_1 = 2$ мПа·с, $T_2 = 660$ К, $\eta_2 = 1,5$ мПа·с (молярная доля Pb – 0); $T_1 = 480$ К, $\eta_1 = 3$ мПа·с, $T_2 = 725$ К, $\eta_2 = 1,8$ мПа·с (молярная доля Pb – 0,3); $T_1 = 612,5$ К, $\eta_1 = 2,8$ мПа·с, $T_2 = 775$ К, $\eta_2 = 1,9$ мПа·с (молярная доля Pb – 1).



Точки – по справочным данным [16], линии – по уравнениям (7), (8), (9)

Рисунок 1. Зависимость динамической вязкости сплава свинец-олово от температуры

Температуре 510 К соответствуют координаты $x_1 = 0,00196$ и $y_1 = 0,69315$, а температуре 660 К – $x_2 = 0,00152$ и $y_2 = 0,40547$ (молярная доля Pb – 0).

Согласно равенствам

$$\ln \eta_0 = y_1 - \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \cdot x_1 \quad (11)$$

и

$$\frac{E}{R} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \quad (12)$$

находим:

$$\ln \eta_0 = 0,69315 - \frac{0,40547 - 0,69315}{0,00152 - 0,00196} \cdot 0,00196 = -0,57265,$$

$$\eta_0 = e^{-0,57265} = 0,56403 \text{ мПа}\cdot\text{с},$$

$$\frac{E}{R} = \frac{0,40547 - 0,69315}{0,00152 - 0,00196} = 645,559,$$

$$E = 645,559 \cdot 8,31441 = 5367,439 \text{ Дж/моль}.$$

Температуре 480 К соответствуют координаты $x_1 = 0,00208$ и $y_1 = 1,09861$, а температуре 725 К – $x_2 = 0,00138$ и $y_2 = 0,58779$ (молярная доля Pb – 0,3).

Согласно равенствам (12) и (13) находим:

$$\ln \eta_0 = 1,09861 - \frac{0,58779 - 1,09861}{0,00138 - 0,00208} \cdot 0,00208 = -0,41301,$$

$$\eta_0 = e^{-0,41301} = 0,66165 \text{ мПа}\cdot\text{с},$$

$$\frac{E}{R} = \frac{0,58779 - 1,09861}{0,00138 - 0,00208} = 725,581,$$

$$E = 725,581 \cdot 8,31441 = 6032,777 \text{ Дж/моль}.$$

Температуре 612,5 К соответствуют координаты $x_1 = 0,00163$ и $y_1 = 1,02962$, а температуре 775 К – $x_2 = 0,00129$ и $y_2 = 0,64185$ (молярная доля Pb – 1). Согласно равенствам (11) и (12) находим:

$$\ln \eta_0 = 1,02962 - \frac{0,64185 - 1,02962}{0,00129 - 0,00163} \cdot 0,00163 = -0,81972,$$

$$\eta_0 = e^{-0,81972} = 0,44055 \text{ мПа}\cdot\text{с},$$

$$\frac{E}{R} = \frac{0,64185 - 1,02962}{0,00129 - 0,00163} = 1132,723,$$

$$E = 1132,723 \cdot 8,31441 = 9417,922 \text{ Дж/моль}.$$

Данные по вязкости сплава свинец-олово в логарифмических координатах размещены в таблице 2, а на рисунке 2 изображен график логарифмической зависимости от обратной температуры.

Уравнение Френкеля для сплава свинец-олово выразится так:

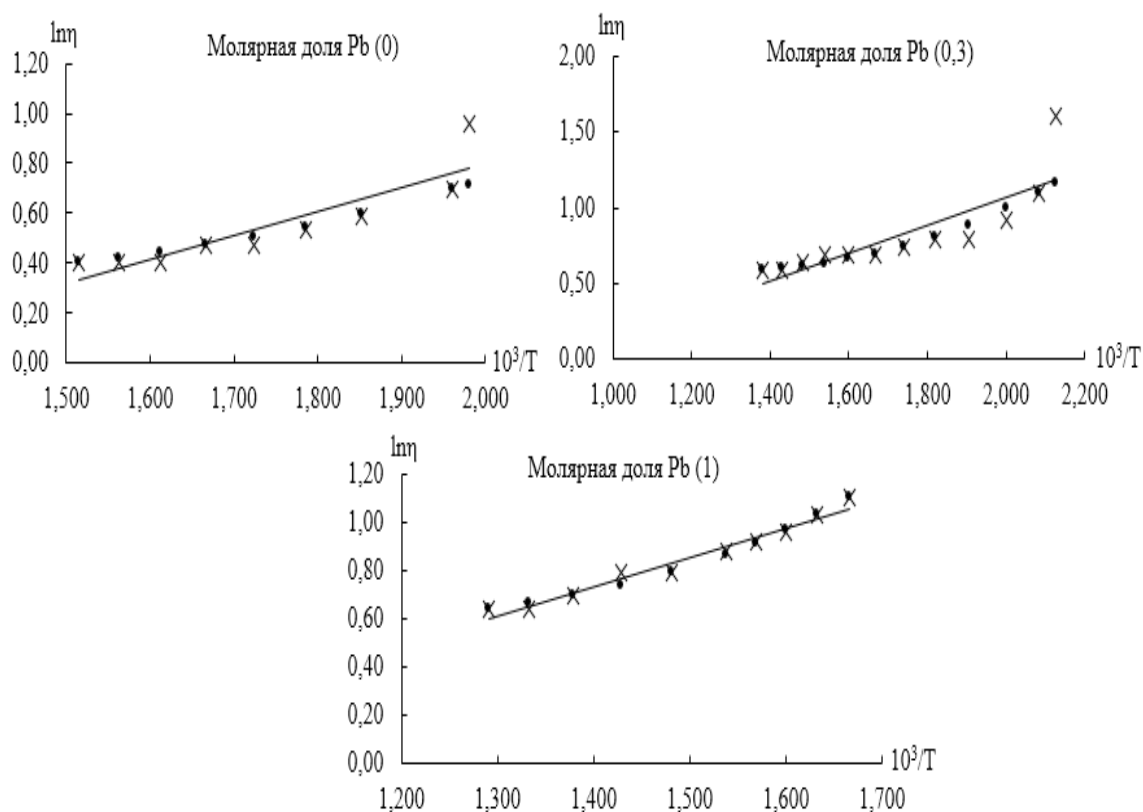
$$\eta = 0,56402 \cdot e^{\frac{5867,489}{RT}}, \text{ мПа}\cdot\text{с}, \quad (13)$$

$$\eta = 0,66165 \cdot e^{\frac{6082,777}{RT}}, \text{ мПа}\cdot\text{с}, \quad (14)$$

$$\eta = 0,44055 \cdot e^{\frac{9417,922}{RT}}, \text{ мПа}\cdot\text{с}. \quad (15)$$

Сопоставление расчетных данных по кластерно-ассоциатным уравнениям (7), (8), (9) и по уравнениям Френкеля (13), (14), (15) приведены в таблице 3.

Коэффициент нелинейной множественной корреляции: $R = 0,765591$ и $t_R = 4,894 \gg 2$ по уравнениям (7) и (13), $R = 0,694907$ и $t_R = 4,250 \gg 2$ по уравнениям (8) и (14), $R = 0,96098041$ и $t_R = 35,523 \gg 2$ по уравнениям (9) и (15), что указывает на близость и адекватность результатов.



Крестики – по справочным данным [16], точки – по логарифмированным расчетным значениям, линия – аппроксимирующая прямая

Рисунок 2. Логарифмическая зависимость вязкости сплава свинец-олово от обратной температуры

Таблица 2. Данные по вязкости сплава свинец-олово в логарифмических координатах

Т, К	$10^3/\eta$	Молярная доля Pb																	
		0						0,3						1					
		η [16], мПа·с	$\ln \eta$ [16]	η , мПа·с	$\ln \eta$	η [16], мПа·с	$\ln \eta$ [16]	η , мПа·с	$\ln \eta$ [16]	η [16], мПа·с	$\ln \eta$ [16]	η , мПа·с	$\ln \eta$						
456	2,193	-	2,644	0,972	-	-	3,526	1,260	-	-	29,149	3,372							
460	2,174	-	2,575	0,946	-	-	3,422	1,230	-	-	25,661	3,245							
470	2,128	-	2,420	0,884	5	1,609	3,193	1,161	-	-	19,144	2,952							
475	2,105	-	2,352	0,855	-	-	3,093	1,129	-	-	16,746	2,818							
480	2,083	-	2,290	0,828	3	1,099	3,000	1,099	-	-	14,762	2,692							
500	2,000	-	2,083	0,734	2,5	0,916	2,696	0,992	-	-	9,544	2,256							
505	1,980	2,6	2,040	0,713	-	-	2,634	0,968	-	-	8,687	2,162							
510	1,961	2	2,000	0,693	-	-	2,576	0,946	-	-	7,950	2,073							
520	1,923	-	1,928	0,657	-	-	2,472	0,905	-	-	6,755	1,910							
525	1,905	-	1,896	0,640	2,2	0,788	2,426	0,886	-	-	6,269	1,836							
540	1,852	1,8	1,812	0,594	-	-	2,304	0,835	-	-	5,132	1,636							
550	1,818	-	1,764	0,568	2,2	0,788	2,236	0,805	-	-	4,572	1,520							
560	1,786	1,7	1,723	0,544	-	-	2,176	0,778	-	-	4,123	1,417							
575	1,739	-	1,669	0,512	2,1	0,742	2,100	0,742	-	-	3,603	1,282							
580	1,724	1,6	1,654	0,503	-	-	2,078	0,731	-	-	3,462	1,242							
600	1,667	1,6	1,600	0,470	2	0,693	2,002	0,694	3	1,099	3,011	1,102							
612,5	1,633	-	1,573	0,453	-	-	1,963	0,675	2,8	1,030	2,800	1,030							
620	1,613	1,5	1,558	0,443	-	-	1,943	0,664	-	-	2,693	0,991							
625	1,600	-	1,549	0,438	2	0,693	1,931	0,658	2,6	0,956	2,629	0,967							
637,5	1,569	-	1,529	0,425	-	-	1,903	0,643	2,5	0,916	2,489	0,912							
640	1,563	1,5	1,525	0,422	-	-	1,898	0,641	-	-	2,464	0,902							
650	1,538	-	1,512	0,413	2	0,693	1,879	0,631	2,4	0,875	2,374	0,865							

Продолжение таблицы 2

T, К	10 ³ Г	Молярная доля Pb											
		0				0,3				1			
		η [16], мПа·с	$\ln \eta$ [16]	η , мПа·с	$\ln \eta$	η [16], мПа·с	$\ln \eta$ [16]	η , мПа·с	$\ln \eta$	η [16], мПа·с	$\ln \eta$ [16]	η , мПа·с	$\ln \eta$
660	1,515	-	1,500	0,405	-	-	1,863	0,622	-	-	-	2,297	0,831
675	1,481	-	1,485	0,395	1,9	0,642	1,842	0,611	2,2	0,788	2,200	0,788	
700	1,429	-	1,466	0,382	1,8	0,588	1,817	0,597	2,2	0,788	2,079	0,732	
725	1,379	-	1,452	0,373	1,8	0,588	1,800	0,588	2	0,693	1,996	0,691	
750	1,333	-	1,444	0,367	-	-	1,790	0,582	1,9	0,642	1,938	0,662	
775	1,290	-	1,439	0,364	-	-	1,786	0,580	1,9	0,642	1,900	0,642	

Таблица 3. Динамическая вязкость сплава свинец-олово по кластерно-ассоциатным уравнениям (7), (8), (9) и по уравнениям Френкеля (13), (14), (15)

Т, К	Молярная доля Рb								
	0			0,3			1		
	η [16], МПа·с	η (7), МПа·с	η (13), МПа·с	η [16], МПа·с	η (8), МПа·с	η (14), МПа·с	η [16], МПа·с	η (9), МПа·с	η (15), МПа·с
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$T_m=456$	–	2,644	2,323	–	3,526	3,248	–	29,149	5,282
460	–	2,575	2,295	–	3,422	3,204	–	25,661	5,169
470	–	2,420	2,227	5	3,193	3,098	–	19,144	4,905
475	–	2,352	2,196	–	3,093	3,048	–	16,746	4,782
480	–	2,290	2,165	3	3,000	3,000	–	14,762	4,665
500	–	2,083	2,051	2,5	2,696	2,824	–	9,544	4,245
505	2,6	2,040	2,025	–	2,634	2,784	–	8,687	4,151
510	2	2,000	2,000	–	2,576	2,745	–	7,950	4,060
520	–	1,928	1,952	–	2,472	2,671	–	6,755	3,891
525	–	1,896	1,929	2,2	2,426	2,635	–	6,269	3,811
540	1,8	1,812	1,864	–	2,304	2,536	–	5,132	3,589
550	–	1,764	1,824	2,2	2,236	2,475	–	4,572	3,455
560	1,7	1,723	1,786	–	2,176	2,417	–	4,123	3,330
575	–	1,669	1,733	2,1	2,100	2,337	–	3,603	3,159
580	1,6	1,654	1,717	–	2,078	2,312	–	3,462	3,106
600	1,6	1,600	1,654	2	2,002	2,217	3	3,011	2,910
612,5	–	1,573	1,618	–	1,963	2,163	2,8	2,800	2,800
620	1,5	1,558	1,598	–	1,943	2,132	–	2,693	2,738
625	–	1,549	1,584	2	1,931	2,113	2,6	2,629	2,698
637,5	–	1,529	1,553	–	1,903	2,065	2,5	2,489	2,604
640	1,5	1,525	1,547	–	1,898	2,056	–	2,464	2,586
650	–	1,512	1,523	2	1,879	2,020	2,4	2,374	2,517
660	1,5	1,500	1,500	–	1,863	1,986	–	2,297	2,451
675	–	1,485	1,468	1,9	1,842	1,939	2,2	2,200	2,359
700	–	1,466	1,418	1,8	1,817	1,866	2,2	2,079	2,222
725	–	1,452	1,374	1,8	1,800	1,800	2	1,996	2,102
750	–	1,444	1,334	–	1,790	1,741	1,9	1,938	1,995
775	–	1,439	1,297	–	1,786	1,687	1,9	1,900	1,900

Заключение. На основе кластерно-ассоциатной модели вязкого течения жидкости построена модель вязкости для сплава свинец-олово. Установлена высокая адекватность предложенной кластерно-ассоциатной модели динамической вязкости сплава свинец-олово по имеющимся справочным данным.

Одна из важнейших характеристик кластерно-ассоциатной модели – степень ассоциации кластеров – закономерно понижается по мере повышения температуры, соответствуя динамике разрушения ассоциатов.

Показана взаимосвязь кластерно-ассоциатной модели с моделью вязкости Френкеля-Андрэде. При температурах 470 К и 505 К для сплава свинец-олово – с молярными долями свинца – 0 и 0,3 – наблюдается сильное расхождение между справочными и расчетными

данными. А при молярной доле свинца – 1 по расчетным данным прослеживаются высокие значения вязкости при низких значениях температуры. Несмотря на вышеописанные нюансы, выведенные модели вязкости сплава функциональны, что подтверждается данными коэффициентов корреляции.

Предложенная модель вязкости способна описывать весь диапазон жидкого состояния вещества, что подтверждается проведенными исследованиями. Это позволяет надежно экстраполировать предлагаемую зависимость как в сторону высоких, так и низких температур, соответственно в область критической точки.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Schmidt P., Schafer R., *Methods in Physical Chemistry* // John Wiley & Sons Limited, Manchester. – 2017. – P. 370.
- [2] Atkins P.W., Julio de Paula, *Elements of Physical Chemistry* // W.H. Freeman and Company, Oxford. – 2016. – P. 656.
- [3] Yazachev T., *Physical Chemistry* // Academic Publishing (Germany), Lambert. – 2014. – P. 148.
- [4] Monk Paul M.S., *Physical chemistry: understanding our chemical world* // John Wiley & Sons Ltd, Manchester Metropolitan University, UK, Manchester. – 2004. – P. 619.
- [5] Rogers D.W., *Concise Physical Chemistry* // John Wiley & Sons, Inc. (Canada), Brooklyn. – 2013. – P. 405.
- [6] Sinitsin N.I., Chikova O.A., V'yukhin V.V. Surface tension and density of Fe-Mn melts [Поверхностное натяжение и плотность расплавов Fe-Mn] // *Izvestiya Ferrous Metallurgy*. – 2020. – 63(1). – P. 40-46.
- [7] Efremov A.M., Murin D.B., Kwon K.H. Plasma parameters, densities of active species and etching kinetics in C_4F_8 +ArGAS mixture // *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Seriya Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya*. – 2019. – 62(2). – P. 31-37.
- [8] Shmeliova D.V., Pozhidaev E.P., Kharlamov S.S., Barbashov V.A., Chigrinov V.G. Capillary flow and shear viscosity of ferroelectric liquid crystal // *Zhidkie Kristally i Ikh Prakticheskoe Ispol'zovanie*. – 2018. – 18(4). – P. 88-94.
- [9] Shmeliova D.V., Pasechnik S.V., Kharlamov S.S., Barbashov V.A., Tkachenko T.P. Capillary flows of nematic liquid crystal // *Crystals*. – 2020. – 10(11), 1029. – P. 1-16.
- [10] Loskutov V.V. Viscosity of mono-, di- and triethylene glycol aqueous solutions at 298.15 K // *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Seriya Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya*. – 2019. – 62(6). – P. 41-46.
- [11] Kirsanov E.A., Timoshin Y.N. Non-newtonian flow of structured systems. XXVII. Viscosity and elasticity of polyisobutylene solution // *Zhidkie Kristally i Ikh Prakticheskoe Ispol'zovanie*. – 2018. – 18(4). – P. 66-77.
- [12] Малышев В.П., Бектурганов Н.С., Турдукожаева (Макашева) А.М. Вязкость, текучесть и плотность веществ как мера их хаотизации. – М.: Научный мир, 2012. – 288 с. [Malyshev V.P., Bekturganov N.S., Turdukozhaeva (Makasheva) A.M. Vyazkost, tekuchest i plotnost veschestv kak mera ih haotizatsii – М.: Nauchnyi mir, 2012. – 288 s.]
- [13] Малышев В.П., Макашева А.М. Вязкость и текучесть расплавов в аспекте их хаотизации (неорганические соединения и сплавы). – Lambert: Academic Publishing (Germany), 2020. – 153 с. [Malyshev V.P., Makasheva A.M. Vyazkost i tekuchest rasplavov v aspekte ih haotizatsii (neorganicheskie soedineniya i splavy). – Lambert: Academic Publishing (Germany), 2020. – 153 s.]
- [14] Malyshev V.P., Makasheva A.M. Relationship between the cluster theory of liquids and the Frenkel-Andrade viscosity model // *Russian Chemical Bulletin*. – 2020. – Vol. 69. – P. 1296-1305.
- [15] Makasheva A.M., Malyshev V.P. Cluster-Associate Model for the Viscosity of Sodium Fluoride in Comparison with the Frenkel Model // *Russian Metallurgy (Metally)*. – 2021. – Vol. 2021, № 2. – P. 176-180.
- [16] Бабичев А.П. и др. Физические величины: Справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с. [Babichev A.P. i dr. Fizicheskie velichiny: Spravochnik. – М.: Energoatomizdat, 1991. – 1232 s.]
- [17] Романцев В.А., Юзов О.В. и др. Metallургический комплекс стран СНГ, экономический аспект. – М.: МИСИС, 2003. – 208 с. [Romantsev V.A., Yuzov O.V. i dr. Metallurgicheskiy kompleks stran SNG, ekonomicheskiy aspekt. – М.: MISIS, 2003. – 208 s.]

[18] Тарасов А.В., Бессер А.Д., Мальцев В.И., Сорокина В.С. *Металлургическая переработка вторичного свинцового сырья*. – М.: Гинцветмет, 2003. – 224 с. [Tarasov A.V., Besser A.D., Maltsev V.I., Sorokina V.S. *Metallurgicheskaya pererabotka vtorichnogo svintsovogo syrya*. – М.: Gintsvetmet, 2003. – 224 s.]

[19] Лякишев Н.П. *Диаграммы состояния двойных металлических систем*. Справочник, т.1. – М.: Машиностроение, 1996. – 992 с. [Lyakishev N.P. *Diagrammyi sostoyaniya dvoynyih metallicheskih sistem*. Spravochnik, t.1. – М.: Mashinostroenie, 1996. – 992 s.]

REFERENCES

[1] Schmidt P., Schafer R., *Methods in Physical Chemistry* // John Wiley & Sons Limited, Manchester. – 2017. – P. 370.

[2] Atkins P.W., Julio de Paula, *Elements of Physical Chemistry* // W.H. Freeman and Company, Oxford. – 2016. – P. 656.

[3] Yazachev T., *Physical Chemistry* // Academic Publishing (Germany), Lambert. – 2014. – P. 148.

[4] Monk Paul M.S., *Physical chemistry: understanding our chemical world* // John Wiley & Sons Ltd, Manchester Metropolitan University, UK, Manchester. – 2004. – P. 619.

[5] Rogers D.W., *Concise Physical Chemistry* // John Wiley & Sons, Inc. (Canada), Brooklyn. – 2013. – P. 405.

[6] Sinitsin N.I., Chikova O.A., V'yukhin V.V. Surface tension and density of Fe-Mn melts [Поверхностное натяжение и плотность расплавов Fe-Mn] // *Izvestiya Ferrous Metallurgy*. – 2020. – 63(1). – P. 40-46.

[7] Efremov A.M., Murin D.B., Kwon K.H. Plasma parameters, densities of active species andetching kinetics in C₄F₈+ArGAS mixture // *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Seriya Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya*. – 2019. – 62(2). – P. 31-37.

[8] Shmeliova D.V., Pozhidaev E.P., Kharlamov S.S., Barbashov V.A., Chigrinov V.G. Capillary flow and shear viscosity of ferroelectric liquid crystal // *Zhidkie Kristally i Ikh Prakticheskoe Ispol'zovanie*. – 2018. – 18(4). – P. 88-94.

[9] Shmeliova D.V., Pasechnik S.V., Kharlamov S.S., Barbashov V.A., Tkachenko T.P. Capillary flows of nematic liquid crystal // *Crystals*. – 2020. – 10(11), 1029. – P. 1-16.

[10] Loskutov V.V. Viscosity of mono-, di- and triethylene glycol aqueous solutions at 298.15 K // *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Seriya Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya*. – 2019. – 62(6). – P. 41-46.

[11] Kirsanov E.A., Timoshin Y.N. Non-newtonian flow of structured systems. XXVII. Viscosity and elasticity of polyisobutylene solution // *Zhidkie Kristally i Ikh Prakticheskoe Ispol'zovanie*. – 2018. – 18(4). – P. 66-77.

[12] Malyshev V.P., Bekturganov N.S., Turdukozhayeva (Makasheva) A.M. *Vyazkost, tekuchest i plotnost veschestv kak mera ih haotizatsii* – М.: Nauchnyy mir, 2012. – 288 s.

[13] Malyshev V.P., Makasheva A.M. *Vyazkost i tekuchest rasplavov v aspekte ih haotizatsii (neorganicheskie soedineniya i splavyi)*. – Lambert: Academic Publishing (Germany), 2020. – 153 s.

[14] Malyshev V.P., Makasheva A.M. Relationship between the cluster theory of liquids and the Frenkel-Andrade viscosity model // *Russian Chemical Bulletin*. – 2020. – Vol. 69. – P. 1296-1305.

[15] Makasheva A.M., Malyshev V.P. Cluster-Associate Model for the Viscosity of Sodium Fluoride in Comparison with the Frenkel Model // *Russian Metallurgy (Metally)*. – 2021. – Vol. 2021, № 2. – P. 176-180.

[16] Babichev A.P. i dr. *Fizicheskie velichiny: Spravochnik*. – М.: Energoatomizdat, 1991. – 1232 s.

[17] Romantsev V.A., Yuzov O.V. i dr. *Metallurgicheskii kompleks stran SNG, ekonomicheskii aspekt*. – М.: MISIS, 2003. – 208 s.

[18] Тарасов А.В., Бессер А.Д., Мальцев В.И., Сорокина В.С. *Металлургическая переработка вторичного свинцового сырья*. – М.: Гинцветмет, 2003. – 224 с.

[19] Лякишев Н.П. *Диаграммы состояния двойных металлических систем*. Справочник, т.1. – М.: Машиностроение, 1996. – 992 с.

А.М. Макашева, Л.А. Бекбаева*

Қарағанды техникалық университеті, Қарағанды, Қазақстан

*e-mail: lyazzat.bekbaeva@mail.ru

ФРЕНКЕЛЬ-АНДРАДЕ МОДЕЛІМЕН САЛЫСТЫРҒАНДАҒЫ ҚОРҒАСЫН-ҚАЛАЙЫ ҚОРЫТПАСЫ ТҰТҚЫРЛЫҒЫНЫҢ КЛАСТЕРЛІ-АССОЦИАТТЫҚ МОДЕЛІ

Андатпа. Мақала ретсіз бөлшектер тұжырымдамасына және оның Френкель-Андрате тұтқырлық моделімен байланысына негізделген қорғасын-қалайы қорытпасының динамикалық тұтқырлығының жалпыланған кластерлі-ассоциаттық моделін жасауға арналған.

Практикалық маңыздылықтан басқа, бейорганикалық қосылыстардың балқымаларының тұтқырлығын зерттеу үлкен ғылыми қызығушылық тудырады, өйткені тұтқырлық - бұл молекулааралық өзара әрекеттесу күштері мен сұйықтықтардағы молекулалық тасымалдау процестерінің механизмі туралы түсінік беретін заттың ең құрылымдық-сезімтал сипаттамасы. Осы саладағы білімнің жинақталуы сұйық күй теориясына қатысты көптеген мәселелерді шешуге мүмкіндік береді.

Бейорганикалық қосылыстар балқымаларының тұтқырлығы бойынша эксперименттік материал айтарлықтай шектеулі, бұл тиісті зерттеулер жүргізумен байланысты елеулі қиындықтармен түсіндіріледі. Сондықтан тұтқырлықты зерттеу үшін сұйықтық теориясымен байланысты көптеген мәселелерді шешуге едәуір жақындататын кластерлі-ассоциаттық модельді қолдану ұсынылады. Френкель-Андрате тұтқырлық моделі аққыштықтың активтену энергиясын бағалауға мүмкіндік береді. Есептеулер көрсеткендей, бұл энергияны кластерлі-ассоциаттық модель аясында алынған кластерлер қауымдастығының дәрежесімен салыстырған кезде өте тығыз сызықтық корреляция байқалады. Бұл жағдайда пропорционалдылық коэффициенті бір кластерге келетін активтендіру энергиясының мағынасына ие. Бұл энергия сұйықтықтағы бөлшектердің өзара әрекеттесуіне тән қанықпаған молекулааралық байланыстың ван-дер-вааль энергиясынан асып кетпейді.

Негізгі сөздер: ретсіз бөлшектер тұжырымдамасы, Больцманнның таралуы, динамикалық тұтқырлық, қорғасын-қалайы қорытпасы, кластер, ассоциат.

A.M. Makasheva, L.A. Bekbayeva*

Karaganda Technical University, Karaganda, Kazakhstan

*e-mail: lyazzat.bekbaeva@mail.ru

CLUSTER-ASSOCIATED MODEL OF THE VISCOSITY OF THE LEAD-TIN ALLOY IN COMPARISON WITH THE FRENKEL-ANDRADE MODEL

Abstract. The article is devoted to the development of a generalized cluster-associated model of the dynamic viscosity of a lead-tin alloy based on the concept of chaotic particles and its relationship with the Frenkel-Andrade viscosity model.

In addition to its practical importance, the study of the viscosity of melts of inorganic compounds is also of great scientific interest, since viscosity is the most structurally sensitive characteristic of a substance, which gives an idea of the forces of intermolecular interaction and the mechanism of molecular transport processes in liquids. The accumulation of knowledge in this field allows us to solve many questions related to the theory of the liquid state.

The experimental data on the viscosity of melts of inorganic compounds is rather limited, which is explained by the serious difficulties associated with conducting relevant studies. Therefore, it is proposed to use a cluster-associated model for the study of viscosity, which significantly approaches the solution of many problems related to the theory of fluid. The Frenkel-Andrade viscosity model allows us to estimate the yield activation energy. Calculations show that when comparing this energy with the degree of cluster association obtained in the framework of the cluster-association model, a fairly close linear correlation is observed. In this case, the proportionality coefficient makes sense of the activation energy per cluster. This energy does not go beyond the van der Waals energy of the unsaturated intermolecular bond characteristic of the interaction of particles in a liquid.

Keywords: concept of randomized particles, Boltzmann distribution, dynamic viscosity, lead-tin alloy, cluster, associate.