



# Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. В. Мокшин, Р. М. Хуснутдинов, Я. З. Вильф, Б. Н. Галимзянов, Квазитвердотельная микроскопическая динамика в равновесных классических жидкостях. Самосогласованная релаксационная теория, *ТМФ*, 2021, том 206, номер 2, 245–268

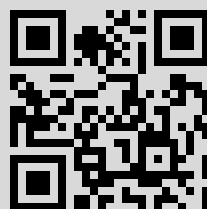
DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9964>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 85.140.0.109

31 января 2021 г., 15:46:10



© 2021 г.

А. В. Мокшин\*, Р. М. Хуснутдинов\*,  
Я. З. Вильф\*, Б. Н. Галимзянов\*

КВАЗИТВЕРДОТЕЛЬНАЯ  
МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА  
В РАВНОВЕСНЫХ КЛАССИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ.  
САМОСОГЛАСОВАННАЯ РЕЛАКСАЦИОННАЯ ТЕОРИЯ

В рамках концепции временных корреляционных функций развивается самосогласованная релаксационная теория поперечной коллективной динамики частиц в жидкостях. Теория согласуется с хорошо известными результатами как для коротковолнового предела (динамика свободно движущейся частицы), так и для длинноволнового (гидродинамического) предела. Получено общее выражение для спектральной плотности  $S_T(k, \omega)$  поперечного потока частиц, реализуемое в диапазоне волновых чисел  $k$ . В области микроскопических пространственных масштабов, сопоставимых с масштабом действия эффективных сил межчастичного взаимодействия, теория воспроизводит переход от режима с типичной равновесной жидкостной динамикой к режиму с коллективной динамикой частиц, в которой проявляются свойства, подобные свойствам твердых тел: эффективная сдвиговая жесткость, поперечные (сдвиговые) акустические волны. В рамках соответствующих приближений получены выражения для спектральной плотности поперечного потока частиц для всех характерных режимов в равновесной коллективной динамике. Получено выражение для закона дисперсии поперечных (сдвиговых) акустических волн, а также соотношения для кинематической сдвиговой вязкости  $\nu$ , скорости поперечного звука  $v^{(T)}$  и соответствующего коэффициента затухания звука  $\Gamma^{(T)}$ . Теоретические результаты сопоставляются с результатами моделирования атомарной динамики жидкого лития вблизи точки плавления.

**Ключевые слова:** жидкость, коллективные возбуждения, сдвиговые волны, гидродинамика, вязкость.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9964>

Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 19-12-00022). Часть работы, связанная с развитием микроскопического описания, выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-02-00407\_a). А. В. Мокшин выражает признательность Фонду развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

\*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия.  
E-mail: anatolii.mokshin@mail.ru

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Отсутствие сдвиговой жесткости – одно из ключевых физико-механических свойств равновесных классических жидкостей, отличающих жидкости от твердых тел [1]–[3]. Это свойство проявляется в том, что жидкости не способны удерживать определенную объемную форму, если нет ограничивающих поверхностей, и принимают форму заполняемого сосуда. Отсутствие сдвиговой жесткости также проявляется в том, что жидкости, в отличие от кристаллических и аморфных твердых тел, не способны поддерживать распространение поперечных, так называемых сдвиговых колебательных процессов [4], [5]. В действительности для равновесных классических жидкостей все происходит именно так лишь при условиях, приближенных к гидродинамическим: когда речь идет о макроскопических пространственных масштабах и о достаточно больших временах наблюдения в соответствующих экспериментах. Так, например, в случае высокочастотного сдвигово-деформационного возмущения под действием переменной силы высокоплотная жидкость демонстрирует упругий отклик, характерный для твердых тел. Это отчетливо обнаруживается в экспериментах по измерению зависящего от частоты модуля упругости [6]. Такая реакция жидкости на возмущение вполне понятна; в простых жидкостях эта реакция наиболее выражено проявляется, когда временной масштаб внешнего механического возмущения  $\tau'$  оказывается по величине соизмерим с временем структурной релаксации  $\tau_s$ , где  $\tau' = 2\pi/\omega'$  и  $\omega'$  – частота возмущения. Кроме того, на микроскопических пространственных масштабах в коллективной динамике молекул высокоплотной жидкости могут проявляться поперечные колебательные процессы, которые являются типичными для твердых тел. В этом случае проявляющаяся микроскопическая сдвиговая жесткость обусловлена действием *эффективных сил притяжения* во взаимодействии между молекулами жидкости, а пространственный масштаб  $l_g$ , на котором проявляется квазижесткость жидкости, должен определяться размером области действия этих сил.

Наличие распространяющихся сдвиговых волн в сжиженных благородных газах (в общем случае в так называемых леннард-джонсовских жидкостях) вблизи тройной точки впервые было подтверждено с помощью методов моделирования равновесной молекулярной динамики [7], [8]. Как оказалось, спектры рассчитываемой спектральной плотности  $C_T(k, \omega)$  поперечного тока молекул при волновых числах  $k$ , соответствующих пространственным масштабам в несколько эффективных линейных размеров молекулы, содержат выраженную компоненту в террагерцовой области с максимумом на частоте  $\omega_c^{(T)} \neq 0$  [7]. Зависимость частоты  $\omega_c^{(T)}$  от волнового числа  $k$  производит закон дисперсии  $\omega_c^{(T)}(k)$ , характеризующий распространение поперечных колебательных процессов в жидкости. При этом в законе дисперсии  $\omega_c^{(T)}(k)$  в области малых волновых чисел  $k$ , как правило, имеется щель с нулевыми значениями частоты  $\omega_c^{(T)}$ . Очевидно, что размер  $k_g$  этой щели должен соотноситься с пространственным масштабом  $l_g$ , на котором в жидкости проявляется квазижесткий сдвиговый отклик.

Методы классического и квантово-механического молекулярно-динамического моделирования остаются вплоть до настоящего времени наиболее подходящим инструментом для непосредственной количественной оценки практически всех эффектов, связанных со сдвиговой колебательной динамикой молекул как в модельных [9]–[11], так и в реальных жидкостях (см., например, [12]–[16]). Хотя прямые

экспериментальные измерения этих эффектов затруднительны, некоторая косвенная информация о сдвиговых волнах в высокоплотных жидкостях может быть получена с помощью экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов (INS) и рентгеновских лучей (IXS) [17]. В частности, эффекты, обусловленные поперечной колебательной динамикой молекул, могут проявляться в контуре динамического структурного фактора  $S(k, \omega)$ , который измеряется в экспериментах INS и IXS [18], [19].

Следует отметить, что ключевые компоненты закона рассеяния в жидкостях – центральная рэлеевская и две симметричные бриллюэновские компоненты – для микроскопических пространственных масштабов, доступных экспериментальным техникам INS и IXS, не являются разделенными, а вклад в общий закон рассеяния  $S(k, \omega)$ , обусловленный поперечной колебательной динамикой, является слабо выраженным и не распознается в виде отдельной компоненты. Характерные для поперечных колебательных процессов особенности, очевидно, должны присутствовать в спектрах  $S(k, \omega)$  в частотной области между рэлеевским и бриллюэновским пиками. В действительности на экспериментальных спектрах  $S(k, \omega)$  в этой частотной области наблюдаются лишь продолжения бриллюэновского и рэлеевского пиков. Как следствие, непосредственная интерпретация экспериментальных данных является затруднительной, а выводы, получаемые в результате этой интерпретации, могут быть неоднозначны [20]–[23].

В качестве известных на сегодняшний день теоретических моделей и подходов, связанных с описанием поперечной коллективной динамики, можно отметить вязкоупругую модель [24], [25], метод обобщенных коллективных мод [26], модель Максвелла–Френкеля для описания закона дисперсии поперечных коллективных мод [27], [28], подход к восстановлению дисперсионных зависимостей продольных и поперечных коллективных мод на основе раздельного и совместного анализа мод (“модель двух осцилляторов”) [29]–[31]. Примечательно также, что наличие поперечных возбуждений может приводить к возникновению так называемой положительной дисперсии продольного звука, состоящей в том, что наблюдаемая/измеряемая скорость звука в определенной области конечных волновых чисел превышает гидродинамические значения [32], [33].

В настоящей работе показано, что описание поперечной коллективной динамики в простых жидкостях может быть выполнено в рамках самосогласованной релаксационной теории. Данное теоретическое описание представляет собой непосредственное развитие идеи о масштабно-временной инвариантности релаксационных процессов в жидкостях [34], [35], на основе которой была развита теория флуктуаций локальной плотности в жидкостях и было продемонстрировано применение этой теории для анализа экспериментальных данных INS и IXS в жидких литии [36], натрии [37], [38], цезии [34], [35], алюминии [39], [40], галлии [41]. В разделе 2 представлен теоретический формализм. Сопоставление теоретических результатов с данными моделирования равновесной молекулярной динамики жидкого лития приводится в разделе 3.

## 2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ

В рамках общего подхода статистической механики равновесную жидкость можно рассматривать как многочастичную систему, ансамбль атомов или молекул [42]. В этом случае для описания как структурных, так и динамических свойств этой жидкости удобно использовать математический аппарат корреляционных функций, функций распределения, моментов и кумулянтов этих функций [43]–[46].

Рассмотрим изотропную систему, которая состоит из  $N$  одинаковых классических частиц массы  $m$ , заключенных в объеме  $V$ . Координаты  $\mathbf{r}_j$  и скорости  $\mathbf{v}_l$ ,  $j, l = 1, \dots, N$ , этих частиц задают  $6N$ -мерное фазовое пространство, в котором может быть определена некоторая динамическая переменная  $A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N)$ . Пусть гамильтониан системы  $H$  является известным. Тогда через распределение плотности фазового пространства  $\rho \propto e^{-(H-\mu N)/(k_B T)}$ , где  $T$  и  $\mu$  – температура и химический потенциал соответственно, может быть определено среднее значение  $\langle A \rangle$ . Кроме того, гамильтониан определяет эволюцию динамической переменной  $A$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} A(t) = \{H, A(t)\} = i\hat{\mathcal{L}}A(t), \quad (1)$$

где  $\{\cdot, \cdot\}$  – скобки Пуассона,  $\hat{\mathcal{L}}$  – оператор Лиувилля, который является эрмитовым [44], [47]. В случае если потенциал межчастичного взаимодействия  $u(r)$  является парным и сферическим, оператор Лиувилля может быть записан в виде

$$\hat{\mathcal{L}} = -i \left\{ \frac{1}{m} \sum_{j=1}^N (\mathbf{p}_j \cdot \nabla_j) - \sum_{l>j=1}^N \nabla_j u(r_{jl}) (\nabla_{\mathbf{p}_j} - \nabla_{\mathbf{p}_l}) \right\}, \quad (2)$$

где  $\mathbf{p}_j$  – импульс  $j$ -й частицы,  $\nabla_j$  и  $\nabla_{\mathbf{p}_j}$  – градиенты координат и импульса соответственно.

**2.1. Динамические переменные.** Пусть поток частиц реализуется в некоторой области обратного пространства волновых векторов  $\mathbf{k}$  и определяется скоростями всех частиц, которые принадлежат заданной пространственной области. Тогда для полного потока частиц справедливо записать следующее выражение:

$$\mathbf{j}_k(t) = \sum_{l=1}^N \mathbf{v}_l(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l(t)}, \quad (3)$$

где  $k = |\mathbf{k}|$  – волновое число,  $\mathbf{r}_l(t)$  – радиус-вектор, характеризующий траекторию  $l$ -й частицы. Полагая, что волновой вектор  $\mathbf{k}$  направлен вдоль координатной оси  $OZ$ , можно ввести соответствующие выражения для продольного потока

$$j_k^{(z)}(t) = \sum_{l=1}^N v_l^{(z)}(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l(t)} \quad (4)$$

и поперечного потока

$$j_k^{(x)}(t) = \sum_{l=1}^N v_l^{(x)}(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l(t)}, \quad j_k^{(y)}(t) = \sum_{l=1}^N v_l^{(y)}(t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l(t)}, \quad (5)$$

где  $v_l^{(x)}$ ,  $v_l^{(y)}$  и  $v_l^{(z)}$  – соответствующие компоненты скорости  $l$ -й частицы,  $\mathbf{v}_l = v_l^{(x)} \mathbf{i}_1 + v_l^{(y)} \mathbf{i}_2 + v_l^{(z)} \mathbf{i}_3$  и  $\mathbf{j}_k = j_k^{(x)} \mathbf{i}_1 + j_k^{(y)} \mathbf{i}_2 + j_k^{(z)} \mathbf{i}_3$ . Величины  $j_k^{(z)}$ ,  $j_k^{(x)}$  и  $j_k^{(y)}$ , как и  $\mathbf{j}_k$ , имеют смысл динамических переменных, характеризующих коллективную динамику многочастичной системы. Очевидно, что равенство поперечных потоковых компонент  $j_k^{(x)}$  и  $j_k^{(y)}$  выполняется для структурно изотропных систем – плотных газов, жидкостей, аморфных твердых тел.

При рассмотрении поперечной коллективной динамики в качестве исходной динамической переменной  $A_1^T$  удобно выбрать поперечный поток:

$$A_1^T(k) = j_k^{(x)} = j_k^{(y)}. \quad (6)$$

Используя процедуру ортогонализации [48]

$$A_{l+1}^T(k) = i\hat{\mathcal{L}}A_l^T(k) + \frac{\langle |A_{l+1}^T(k)|^2 \rangle}{\langle |A_l^T(k)|^2 \rangle} A_{l-1}^T(k), \quad l = 1, 2, 3, \dots, \quad A_0^T \equiv 0, \quad (7)$$

получаем набор динамических переменных

$$\mathbf{A}^T(k) = \{A_1^T(k), A_2^T(k), A_3^T(k), \dots, A_l^T(k), \dots\}, \quad (8)$$

удовлетворяющих следующему условию ортонормированности:

$$\langle A_i^T(-k)A_j^T(k) \rangle = \delta_{i,j} \langle |A_j^T(k)|^2 \rangle, \quad i, j = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

Здесь угловые скобки обозначают усреднение по статистическому ансамблю,  $\delta_{i,j}$  – символ Кронекера.

Из выражений (6), (7) находим, что динамическая переменная  $A_2^T(k)$  соотносится с ускорением и кинетической энергией в поперечной коллективной динамике частиц:

$$A_2^T(k) = \sum_{l=1}^N \dot{v}_l^{(x)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} - i \sum_{l=1}^N k_x (v_l^{(x)})^2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l}, \quad (10)$$

тогда как для третьей динамической переменной получаем

$$\begin{aligned} A_3^T(k) = & \sum_{l=1}^N \ddot{v}_l^{(x)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} - 3i \sum_{l=1}^N k_x \dot{v}_l^{(x)} v_l^{(x)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} - \\ & - \sum_{l=1}^N k_x^2 (v_l^{(x)})^3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} + \frac{\langle |A_2^T(k)|^2 \rangle}{\langle |A_1^T(k)|^2 \rangle} \sum_{l=1}^N v_l^{(x)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l}. \end{aligned} \quad (11)$$

Динамическая переменная  $A_3^T(k)$  характеризует изменение ускорения частицы.

**2.2. Корреляционные функции, частотные моменты и релаксационные параметры.** Для динамических переменных набора  $\mathbf{A}^T(k)$  определим временные корреляционные функции (ВКФ):

$$M_l^T(k, t) = \frac{\langle A_l^T(-k, 0)A_l^T(k, t) \rangle}{\langle |A_l^T(k, 0)|^2 \rangle}, \quad l = 1, 2, \dots, \quad (12)$$

где  $M_1^T(k, t) \equiv C_T(k, t)$ . ВКФ  $M_l^T(k, t)$  обладают следующими свойствами [49], [50]:

$$M_l^T(k, t)|_{t=0} = 1, \quad (13a)$$

$$\left. \frac{d^p}{dt^p} M_l^T(k, t) \right|_{t=0} = 0, \quad \text{если } p \text{ нечетное,} \quad (13b)$$

$$\left. \frac{d^p}{dt^p} M_l^T(k, t) \right|_{t=0} \neq 0, \quad \text{если } p \text{ четное,}$$

$$|M_l^T(k, t)| \leq 1, \quad (13в)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} M_l^T(k, t) = 0. \quad (13г)$$

Свойства (13а), (13б) и (13в) отображают тот факт, что ВКФ  $M_l^T(k, t)$  принимает в начальный момент времени максимальное значение, равное единице. Свойство (13г) соотносится с эргодичностью и указывает на ослабление корреляций со временем.

Тогда ВКФ поперечного потока есть

$$M_1^T(k, t) = C_T(k, t) = \frac{\langle j_{-k}^{(x)}(0) j_k^{(x)}(t) \rangle}{\langle |j_k^{(x)}(0)|^2 \rangle}. \quad (14)$$

Эта величина связывается со спектральной плотностью ВКФ поперечного потока соотношением

$$C_T(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} C_T(k, t) e^{i\omega t} dt. \quad (15)$$

Величина  $\langle |j_k^{(x)}(0)|^2 \rangle$  в выражении (14) равна

$$\langle |j_k^{(x)}(0)|^2 \rangle = \omega_T^{(0)}(k) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N (v_l^{(x)})^2 = \frac{k_B T}{m}. \quad (16)$$

Определим частотные моменты спектральной плотности  $C_T(k, \omega)$  следующим образом:

$$\langle \omega_T^{(l)}(k) \rangle = (-i)^l \frac{d^l}{dt^l} C_T(k, t) \Big|_{t=0} = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^l C_T(k, \omega) d\omega / \int_{-\infty}^{\infty} C_T(k, \omega) d\omega, \quad (17)$$

$$l = 1, 2, \dots$$

Как следует из свойства (13б), ненулевые значения принимают лишь четные частотные моменты  $\omega_T^{(2)}(k)$ ,  $\omega_T^{(4)}(k)$ ,  $\omega_T^{(6)}(k)$ , ...

Введем частотные релаксационные параметры

$$\Delta_{T, l+1}^2(k) = \frac{\langle |A_{l+1}^T(k)|^2 \rangle}{\langle |A_l^T(k)|^2 \rangle}, \quad l = 1, 2, 3, \dots \quad (18)$$

Индекс Т означает, что параметры рассчитываются на основе динамических переменных, имеющих отношение к поперечной динамике, индекс  $l$  – порядковый номер параметра в соответствии с набором динамических переменных  $\mathbf{A}^T(k)$ .

Параметры  $\Delta_{T, l}^2(k)$  обладают следующими свойствами<sup>1)</sup> [36]. Во-первых, частотный релаксационный параметр  $l$ -го порядка характеризует время релаксации  $\tau_{T, l}(k)$  процесса, соотносимого с динамической переменной  $A_l^T(k)$ :

$$\tau_{T, l}(k) = \frac{1}{\sqrt{\Delta_{T, l}^2(k)}}. \quad (19)$$

<sup>1)</sup> В формализме Мори параметры  $\Delta_{T, l}^2(k)$  называются статическими корреляционными функциями [47], в методе рекуррентных соотношений Ли параметры  $\Delta_{T, l}^2(k)$  обозначают рекуррентные коэффициенты [50].

Так, например, как следует из выражений (6), (10) и (18), в коротковолновом пределе, соответствующем свободной динамике частиц, частотный релаксационный параметр  $\Delta_{T,2}^2(k)$  характеризует среднее время пробега частицы на пространственном масштабе  $\ell = 2\pi/k$ :

$$\tau_{T,2}(k) = \frac{1}{\sqrt{k_x^2(k_B T)/m}} = \frac{1}{\sqrt{(k_x \bar{v}_x)^2}}, \quad (20)$$

где  $k_x \equiv k$  и величина  $\bar{v}_x$  – средняя скорость частицы. Детальное обсуждение этого свойства приводится в работе [51].

Во-вторых, частотные релаксационные параметры связываются с частотными моментами [52]:

$$\begin{aligned} \Delta_{T,2}^2(k) &= \langle \omega_T^{(2)}(k) \rangle, \\ \Delta_{T,3}^2(k) &= \frac{\langle \omega_T^{(4)}(k) \rangle}{\langle \omega_T^{(2)}(k) \rangle} - \langle \omega_T^{(2)}(k) \rangle, \\ \Delta_{T,4}^2(k) &= \frac{\langle \omega_T^{(6)}(k) \rangle \langle \omega_T^{(2)}(k) \rangle - (\langle \omega_T^{(4)}(k) \rangle)^2}{\langle \omega_T^{(4)}(k) \rangle \langle \omega_T^{(2)}(k) \rangle - (\langle \omega_T^{(2)}(k) \rangle)^3}. \end{aligned} \quad (21)$$

Выражения (21) известны также как *правила сумм* спектра  $C_T(k, \omega)$ . Математический смысл этого свойства заключается в том, что конкретной форме спектра  $C_T(k, \omega)$  можно поставить в соответствие уникальный набор значений частотных релаксационных параметров. Как следствие, правила сумм могут быть использованы для проверки корректности предлагаемой теоретической модели для спектра  $C_T(k, \omega)$ . В этом случае значения частотных релаксационных параметров, получаемые на основе какой-либо теоретической модели, сопоставляются со значениями этих параметров, получаемых через определение частотных моментов путем численного расчета интегральных выражений для частотных моментов на основе экспериментального спектра  $C_T(k, \omega)$  (см. второе равенство в (17)).

И, наконец, как следует из соотношений (6), (10) и (11), частотные релаксационные параметры могут быть выражены через микроскопические характеристики системы, такие как средняя скорость частицы, потенциал межчастичного взаимодействия, функции распределения частиц [47]. Так, например, в случае набора динамических переменных, определяемых выражениями (6), (10) и (11), частотный релаксационный параметр  $\Delta_{T,2}^2(k)$  есть

$$\Delta_{T,2}^2(k) = \left( \frac{k_B T}{m} \right)^2 k^2 + \frac{\rho}{m} \int [1 - \cos(kz)] \frac{\partial^2 u(r)}{\partial x^2} g(r) d^3 \mathbf{r}, \quad (22)$$

где  $\rho$  – количественная плотность частиц,  $g(r)$  – функция парного радиального распределения частиц в системе. Также можно получить микроскопические выражения для других частотных релаксационных параметров  $\Delta_{T,3}^2(k)$ ,  $\Delta_{T,4}^2(k)$ , ... [47]. Для непосредственных численных расчетов эти микроскопические выражения, как правило, не используются, поскольку в них содержатся функции распределения многих частиц, и для соответствующих вычислений необходимо решать известную задачу о размыкании цепочки уравнений для функций распределения частиц [53]. Следует



отметить, что данные частотные релаксационные параметры можно также рассчитать на основе базового определения (18) с конфигурационными данными (траекториями и скоростями частиц), полученными, например, из молекулярно-динамического моделирования (см. приложение в работе [36]). Последующий анализ значений частотных релаксационных параметров позволяет определить такие физические характеристики системы как скорость распространения звука, коэффициент затухания звука, средняя скорость частиц и другие [36].

**2.3. Функция  $C_T(k, t)$  в гидродинамическом пределе.** В случае поперечной коллективной динамики в жидкости общеизвестными являются решения лишь в двух предельных случаях: в гидродинамическом пределе ( $k \rightarrow 0$ ) и в пределе свободно движущейся частицы (высокие значения волнового числа  $k$ ).

В гидродинамическом пределе временная эволюция поперечного потока  $j_k^{(x)}$  задается уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t} j_k^{(x)}(t) = -\nu k^2 j_k^{(x)}(t), \quad (23)$$

где  $\nu$  – кинематическая сдвиговая вязкость. Решение этого уравнения имеет следующий вид:

$$j_k^{(x)}(t) = j_k^{(x)}(0) e^{-\nu k^2 t}. \quad (24)$$

Умножая уравнение (23) на комплексно-сопряженную величину  $j_{-k}^{(x)}(0)/\langle |j_k^{(x)}(0)|^2 \rangle$  и выполняя усреднение по ансамблю, получаем уравнение для ВКФ  $C_T(k, t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_T(k, t) = -\nu k^2 C_T(k, t). \quad (25)$$

Решение уравнения (25) имеет вид

$$C_T(k, t) = e^{-\nu k^2 t}. \quad (26)$$

Действуя на выражение (26) оператором преобразования Фурье

$$FT\{f\}(\omega) = f(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} f(t) dt,$$

получаем выражение для спектральной плотности ВКФ поперечного потока:

$$C_T(k, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\nu k^2}{\omega^2 + (\nu k^2)^2}. \quad (27)$$

Таким образом, ВКФ  $C_T(k, t)$  в гидродинамическом пределе характеризуется экспоненциально затухающей временной зависимостью со временем релаксации  $\tau = 1/(\nu k^2)$  и гауссовой зависимостью от  $k$ . Отсутствие высокочастотных компонент в спектре  $C_T(k, \omega)$ , определяемом выражением (27), указывает на отсутствие поперечных акустических волн в гидродинамическом режиме.

**2.4. Функция  $C_T(k, t)$  в коротковолновом пределе.** Рассмотрим коротковолновой предел, в котором динамика частиц реализуется на пространственных масштабах, сопоставимых с длиной свободного пробега. Временные и пространственные масштабы в этом случае настолько малы, что фактически частицы демонстрируют свободное движение. В случае свободного движения произвольной  $i$ -й

частицы ее скорость будет постоянной,  $v_i^{(x)}(t) = v_i^{(x)}$ . Тогда для ВКФ поперечного потока имеем [43]

$$C_T(k, t) = \frac{m}{k_B T} \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N (v_i^{(x)})^2 e^{-i\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r}_j(t) - \mathbf{r}_i(0)]} = e^{-k_B T k^2 t^2 / 2m}. \quad (28)$$

Для спектральной плотности  $C_T(k, \omega)$  находим

$$C_T(k, \omega) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T k^2}} e^{-m\omega^2 / 2k_B T k^2} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \frac{1}{\bar{v}_x k} e^{-\omega^2 / 2\bar{v}_x^2 k^2}. \quad (29)$$

Подобно выражению (27) соотношение (29) определяет спектр, в котором отсутствуют высокочастотные компоненты.

**2.5. Поперечный поток на диапазоне волновых чисел.** Из уравнений движения Лиувилля для динамических переменных  $A_1^\Gamma(k)$ ,  $A_2^\Gamma(k)$ ,  $A_3^\Gamma(k)$  и  $A_4^\Gamma(k)$  (см. выражения (6), (10) и (11)) можно получить точно два взаимосвязанных кинетических интегро-дифференциальных уравнения, содержащих ВКФ этих переменных  $C_T(k, t)$ ,  $M_2^\Gamma(k, t)$ ,  $M_3^\Gamma(k, t)$  и  $M_4^\Gamma(k, t)$  [44], [50], [52]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} C_T(k, t) + \Delta_{T,2}^2(k) C_T(k, t) + \Delta_{T,3}^2(k) \int_0^t M_3^\Gamma(k, t - \tau) \frac{\partial}{\partial \tau'} C_T(k, \tau') d\tau &= 0, \\ \frac{\partial^2}{\partial t^2} M_2^\Gamma(k, t) + \Delta_{T,3}^3(k) M_2^\Gamma(k, t) + \Delta_{T,4}^2(k) \int_0^t M_4^\Gamma(k, t - \tau) \frac{\partial}{\partial \tau'} M_2^\Gamma(k, \tau') d\tau &= 0. \end{aligned} \quad (30)$$

Применяя к уравнениям (30) преобразование Лапласа

$$L\Gamma\{f\}(s) = \tilde{f}(s) = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt, \quad s = i\omega, \quad (31)$$

и выражая лаплас-образ ВКФ поперечного потока  $\tilde{C}_T(k, s)$ , находим

$$\tilde{C}_T(k, s) = \frac{1}{s + \frac{\Delta_{T,2}^2(k)}{s + \frac{\Delta_{T,3}^2(k)}{s + \Delta_{T,4}^2(k) \tilde{M}_4^\Gamma(k, s)}}} = \frac{1}{s + \frac{\Delta_{T,2}^2(k)}{s + \frac{\Delta_{T,3}^2(k)}{s + \frac{\Delta_{T,4}^2(k)}{s + \dots}}}}. \quad (32)$$

Величина  $\tilde{C}_T(k, s)$  связывается со спектральной плотностью  $C_T(k, \omega)$  соотношением

$$C_T(k, \omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re}[\tilde{C}_T(k, s = i\omega)]. \quad (33)$$

Ключевая идея самосогласованной релаксационной теории равновесных жидкостей заключается в том, что описание равновесной динамики на всем диапазоне волновых чисел  $k$  осуществляется с помощью динамических переменных набора  $\mathbf{A}(k)$ , соотносимых с переменными гидродинамической теории [36]. А именно, динамическая переменная набора  $\mathbf{A}(k)$  либо точно соответствует гидродинамической величине, либо содержит гидродинамическую величину в своем выражении (см., например, обсуждение в п. 2.1). В случае описания поперечной коллективной динамики

переменные, входящие в соответствующие гидродинамические уравнения, соотносятся с динамическими переменными  $A_1^T(k)$  и  $A_2^T(k)$ .

В гидродинамическом пределе  $k \rightarrow 0$  такие переменные, как поток и энергия, являются медленными с большими временами релаксации [54]. Это позволяет исключить из рассмотрения учет других переменных через использование простого марковского приближения в кинетических уравнениях [55]. В соответствии с самосогласованной релаксационной теорией характерные времена релаксации процессов, соотносимых с гидродинамическими переменными и другими переменными, также различаются, и это различие может быть существенным. Однако сокращение в описании реализуется не через игнорирование “негидродинамических” переменных, а через предположение о сопоставимости их характерных временных масштабов:

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta_{T,l}^2(k)}} = \frac{1}{\sqrt{\Delta_{T,l+1}^2(k)}} = \frac{1}{\sqrt{\Delta_{T,l+2}^2(k)}}, \quad l \in \mathbb{N}^*. \quad (34)$$

В случае поперечной коллективной динамики с расширенным набором переменных, в который кроме величин  $A_1^T(k)$  и  $A_2^T(k)$  также входит поток энергии  $A_3^T(k)$ , имеем  $l = 4$ . Следует отметить, что полностью эквивалентный набор переменных – плотность  $A_0(k)$ , продольный поток  $A_1(k)$ , энергия  $A_2(k)$  и поток энергии  $A_3(k)$  – реализуется при описании продольной коллективной динамики частиц в равновесных жидкостях [36].

Из выражения (32) с учетом (31) находим выражения для лаплас-образов ВКФ:

$$\widetilde{M}_3^T(k, s) = \frac{-s \pm \sqrt{s^2 + 4\Delta_{T,4}^2(k)}}{2\Delta_{T,4}^2(k)}, \quad (35a)$$

$$\widetilde{M}_2^T(k, s) = \frac{2\Delta_{T,4}^2(k)}{s[2\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)] \pm \Delta_{T,3}^2(k)\sqrt{s^2 + 4\Delta_{T,4}^2(k)}}, \quad (35б)$$

$$\begin{aligned} \widetilde{C}_T(k, s) &= \widetilde{M}_1^T(k, s) = \\ &= \frac{s[2\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)] \pm \Delta_{T,3}^2(k)\sqrt{s^2 + 4\Delta_{T,4}^2(k)}}{2\Delta_{T,2}^2(k)\Delta_{T,4}^2(k) + s^2[2\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)] \pm s\Delta_{T,3}^2(k)\sqrt{s^2 + 4\Delta_{T,4}^2(k)}}. \end{aligned} \quad (35в)$$

Тогда из (35в) и (33) находим непосредственно выражение для спектральной плотности поперечного потока частиц:

$$C_T(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Delta_{T,2}^2(k)\Delta_{T,3}^2(k)}{\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)} \frac{\pm\sqrt{4\Delta_{T,4}^2(k) - \omega^2}}{\omega^4 + \mathcal{A}_1^T(k)\omega^2 + \mathcal{A}_2^T(k)}, \quad (36a)$$

$$\mathcal{A}_1^T(k) = \frac{\Delta_{T,3}^4(k) + \Delta_{T,2}^2(k)\Delta_{T,3}^2(k) - 2\Delta_{T,2}^2(k)\Delta_{T,4}^2(k)}{\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)}, \quad (36б)$$

$$\mathcal{A}_2^T(k) = \frac{\Delta_{T,2}^4(k)\Delta_{T,4}^2(k)}{\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)}. \quad (36в)$$

Как следует из выражения (36a), контур частотного спектра  $C_T(k, \omega)$  определяется частотными параметрами  $\Delta_{T,2}^2(k)$ ,  $\Delta_{T,3}^2(k)$  и  $\Delta_{T,4}^2(k)$ , а следовательно, определяется

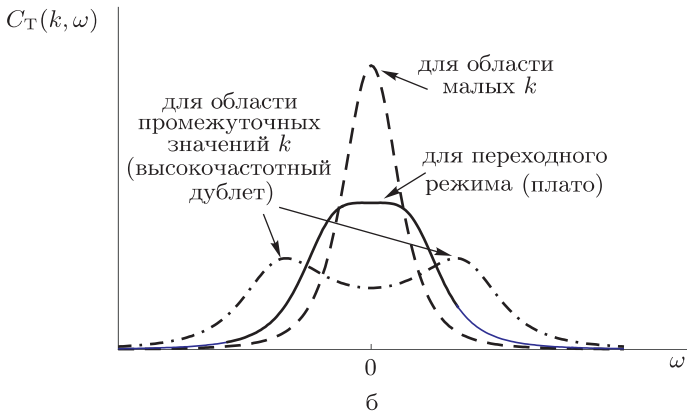
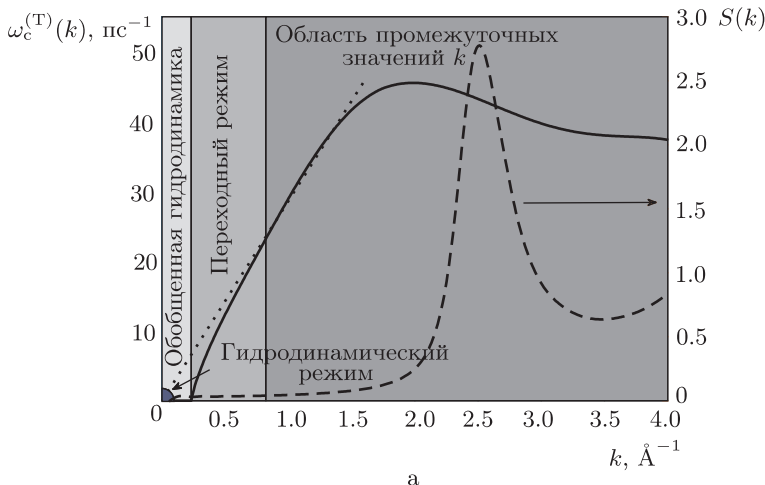


Рис. 1. Схема, демонстрирующая закон дисперсии поперечных подобных акустическим колебаний  $\omega_c^{(T)}(k)$  и статический структурный фактор  $S(k)$  некоторой равновесной жидкости (а). Схема, показывающая вид спектра поперечного потока  $C_T(k, \omega)$  для области промежуточных значений волнового числа  $k$ , для переходного режима и в области обобщенной гидродинамики (в пределе малых значений  $k$ ) (б).

структурными особенностями системы и межчастичным взаимодействием, а также зависит от термодинамического состояния системы.

В поперечной коллективной динамике частиц равновесной жидкости можно выделить характерные режимы, которые удобно рассматривать в соответствии с законом дисперсии поперечных подобных акустическим колебаний  $\omega_c^{(T)}(k)$  и со статическим структурным фактором  $S(k)$  (см. рис. 1а). При увеличении значений волнового числа на  $k$ -шкале имеют место следующие режимы: гидродинамический предел ( $k \rightarrow 0$ ), режим обобщенной гидродинамики, переходная область, область промежуточных значений  $k$  и коротковолновой предел (на рис. 1 не показан).

2.5.1. *Коротковолновой предел.* Динамика частиц в коротковолновом пределе характеризуется единственным параметром – средней скоростью частиц  $\bar{v}_x$ . Частотные релаксационные параметры связываются следующим рекуррентным соотношением:

$$\Delta_{T,l+2}^2(k) = (l+1)\Delta_{T,2}^2(k), \quad l = 1, 2, \dots, \quad (37)$$

где равенство  $\Delta_{T,2}^2(k) = (k\bar{v}_x)^2$  следует из (22), если пренебречь межчастичным взаимодействием. В этом случае выражение (36а) для спектральной плотности  $C_T(k, \omega)$  с учетом (37) принимает вид

$$C_T(k, \omega) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\Delta_{T,2}^2(k)}} e^{-\omega^2/2\Delta_{T,2}^2(k)}, \quad (38)$$

что точно соответствует правильному модельному результату (29).

2.5.2. *Область промежуточных значений  $k$ .* Данная область реализуется при волновых числах, которые соответствуют пространственным масштабам, сопоставимым с эффективным масштабом действия потенциала межчастичного взаимодействия. На рис. 1а данная область волновых чисел обозначена темно-серым цветом. На этих пространственных масштабах в жидкости проявляется сдвиговая жесткость и реализуется квазитвердотельная коллективная динамика, поддерживающая поперечные колебательные процессы. Спектральная плотность  $C_T(k, \omega)$  в этом режиме представляет собой высокочастотный дублет – два выраженных симметричных максимума, располагающихся на частотах  $\pm \omega_c^{(T)}$ , и минимум на нулевой частоте ( $\omega = 0$ ) (рис. 1б). При этом дисперсия  $\omega_c^{(T)} = \omega_c^{(T)}(k)$  поперечных коллективных возбуждений в равновесной высокоплотной жидкости вблизи точки плавления должна экстраполироваться в область малых волновых чисел в виде обычного линейного соотношения:

$$\omega_c^{(T)}(k) = v^{(T)}k, \quad (39)$$

где  $v^{(T)}$  – скорость распространения поперечных звуковых волн.

Частотный релаксационный параметр  $\Delta_{T,4}^2(k)$  характеризует наименьший временной масштаб  $\tau_{T,4}(k) = 1/\sqrt{\Delta_{T,4}^2(k)}$ , на котором реализуется поперечная коллективная динамика частиц. Следовательно, для интересующей нас частотной области можно записать

$$\omega^2 \ll \Delta_{T,4}^2(k). \quad (40)$$

Тогда выражение (36а) принимает вид

$$C_T(k, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta_{T,2}^2(k)\Delta_{T,3}^2(k)\sqrt{\Delta_{T,4}^2(k)}}{\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)} \frac{1}{\omega^4 + \mathcal{A}_1^T(k)\omega^2 + \mathcal{A}_2^T(k)}, \quad (41)$$

где коэффициенты  $\mathcal{A}_1^T(k)$  и  $\mathcal{A}_2^T(k)$  определяются выражениями (36б) и (36в) соответственно.

Отметим некоторые важные свойства выражения (41). Во-первых, поскольку спектральная плотность может принимать лишь неотрицательные значения,  $C_T(k, \omega) \geq 0$ , должно выполняться следующее соответствие между частотными параметрами  $\Delta_{T,3}^2(k)$  и  $\Delta_{T,4}^2(k)$ :

$$\Delta_{T,4}^2(k) \geq \Delta_{T,3}^2(k), \quad (42)$$

которое полностью согласуется с условием (40) о наименьшем временном масштабе. Во-вторых, форма спектра  $C_T(k, \omega)$  при фиксированном  $k$  определяется биквадратным полиномом в знаменателе в выражении (41). Практически все спектральные особенности  $C_T(k, \omega)$  могут быть достаточно просто определены в рамках обычного математического анализа выражения (41).

Далее, решая задачу на существование экстремума, находим из выражения (41) закон дисперсии

$$\omega_c^{(T)}(k) = \sqrt{-\frac{\mathcal{A}_1^T(k)}{2}} \quad (43a)$$

или

$$\omega_c^{(T)}(k) = \sqrt{\Delta_{T,2}^2(k) - \frac{\Delta_{T,3}^2(k)[\Delta_{T,3}^2(k) - \Delta_{T,2}^2(k)]}{2[\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)]}}. \quad (43b)$$

Как видно из (43a), высокочастотный дублет в спектре  $C_T(k, \omega)$  будет появляться при условии  $\mathcal{A}_1^T(k) < 0$  (см. рис. 1), которое подобно условию существования высокочастотных возбуждений согласно вязкоупругой модели (с. 268 в монографии [43]):

$$\omega_c^{(T)}(k) = \sqrt{\Delta_{T,2}^2(k) - \frac{1}{2\tau_t^2(k)}} \quad (44)$$

с временем релаксации  $\tau_t(k)$ . Сопоставляя (43b) и (44), находим определение для времени релаксации в рамках самосогласованной релаксационной теории с выражением (41):

$$\tau_t^2(k) = \frac{\Delta_{T,3}^2(k)[\Delta_{T,3}^2(k) - \Delta_{T,2}^2(k)]}{\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)}. \quad (45)$$

Важно отметить, что в вязкоупругой модели величина  $\tau_t^2(k)$  оставалась неопределенной. Интересным следствием полученного выражения (43a) для закона дисперсии является то, что дисперсия поперечных коллективных возбуждений определяется потенциалом межчастичного взаимодействия  $u(r)$ , а также двухчастичными, трехчастичными и четырехчастичными корреляциями. Этот вывод следует непосредственно из микроскопических выражений для частотных релаксационных параметров, входящих в выражение (43a).

И, наконец, выражение (41) позволяет выполнить оценку значений физических величин, характеризующих распространение в жидкости сдвиговых колебаний, – скорость распространения  $v^{(T)}$  и коэффициент затухания  $\Gamma^{(T)}$  поперечных звуковых колебаний. Так, для скорости  $v^{(T)}$  из закона дисперсии (43b) находим

$$v^{(T)}k = \lim_{k \rightarrow 0} \sqrt{\Delta_{T,2}^2(k) - \frac{\Delta_{T,3}^2(k)[\Delta_{T,3}^2(k) - \Delta_{T,2}^2(k)]}{2[\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)]}} \quad (46a)$$

или

$$v^{(T)}k = \lim_{k \rightarrow 0} \sqrt{\frac{2\Delta_{T,2}^2(k)\Delta_{T,4}^2(k)}{2\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)}}. \quad (46b)$$

Выражение (46a) получается в результате решения дисперсионного уравнения в соответствии с приближенной схемой, представленной Маунтейном в обзоре [56]

(см. также [36]). Выражения (46a) и (46б) должны производить близкие значения для  $v^{(T)}$ . Для коэффициента затухания поперечного звука получаем

$$\Gamma^{(T)} k^2 = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\Delta_{T,3}^2(k) \sqrt{\Delta_{T,4}^2(k)}}{2\Delta_{T,4}^2(k) - \Delta_{T,3}^2(k)}. \quad (47)$$

Таким образом, из выражений (46a), (46б) и (47) можно вычислить значения величин  $v^{(T)}$  и  $\Gamma^{(T)}$  соответственно. Для этих вычислений должны использоваться значения частотных параметров, соответствующих волновым числам области промежуточных значений  $k$ , где проявляются квазитвердотельные свойства жидкости. Отметим, что выражение (47) также представляет интерес по той причине, что непосредственные экспериментальные измерения величины  $\Gamma^{(T)}$  являются весьма затруднительными.

**2.5.3. Переходный режим.** Выражение (41) для спектральной плотности  $C_T(k, \omega)$  с законом дисперсии  $\omega_c^{(T)}(k)$  вида (43a) указывает на существование режима в поперечной коллективной динамике частиц, где происходит переход от квазитвердотельной динамики, обсуждение которой приводилось выше, к динамике обычной равновесной жидкости. На рис. 1a область волновых чисел, соответствующая этому режиму, обозначена серым цветом. Здесь в спектре  $C_T(k, \omega)$  высокочастотный дублет преобразуется в единственную уширенную спектральную компоненту, которая имеет форму сглаженной трапеции, центр которой располагается на нулевой частоте  $\omega = 0$  (см. рис. 1б). Касательные к дисперсионной кривой  $\omega_c^{(T)}(k)$  при соответствующих волновых числах экстраполируются в конечные значения  $k$  при  $\omega_c^{(T)} \rightarrow 0$  (см. рис. 1а).

Наличие данного режима является вполне понятным и обусловлено тем, что переход к квазитвердотельной коллективной динамике происходит в некоторой области пространственных масштабов и, следовательно, в некоторой области волновых чисел. Анализ выражения (41) для  $C_T(k, \omega)$  обнаруживает, что такой переход реализуется при следующем соответствии между частотными релаксационными параметрами:

$$\begin{aligned} \Delta_{T,3}^2(k) &= 3\Delta_{T,2}^2(k), \\ \Delta_{T,4}^2(k) &= 2\Delta_{T,3}^2(k) = 6\Delta_{T,2}^2(k). \end{aligned} \quad (48)$$

В этом случае для коэффициентов  $\mathcal{A}_1^T(k)$  и  $\mathcal{A}_2^T(k)$  в выражении (41) находим

$$\mathcal{A}_1^T(k) = 0, \quad (49a)$$

$$\mathcal{A}_2^T(k) = 2\Delta_{T,2}^4(k), \quad (49б)$$

и выражение (41) принимает вид

$$C_T(k, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta_{T,2}^2(k) \sqrt{6\Delta_{T,2}^2(k)}}{\omega^4 + 2\Delta_{T,2}^4(k)}. \quad (50)$$

В действительности правила соответствия (48) между частотными релаксационными параметрами эквивалентны соотношению (49a) и представляют собой условия возникновения данного переходного режима.

В свою очередь, как видно из выражения (50), коллективная поперечная динамика определяется лишь частотным релаксационным параметром  $\Delta_{T,2}^2(k)$  и, следовательно, потенциалом межчастичного взаимодействия  $u(r)$ , функцией радиального распределения частиц  $g(r)$  и средней скоростью частиц  $\bar{v}_x$ . Данный режим соотносится с переходом от описания коллективной динамики в терминах микроскопических характеристик к описанию, где возможно использование гидродинамических параметров, таких как обобщенные вязкость  $\nu(k)$  и температуропроводность  $D_T(k)$ .

2.5.4. *Режим обобщенной гидродинамики.* Данный режим соответствует малым волновым числам и переходит в обычный гидродинамический режим в пределе  $k \rightarrow 0$ . Здесь проявляется типичная жидкостная коллективная динамика, и поперечные акустические волны отсутствуют, т. е.  $\omega_c^{(T)} = 0$ . На рис. 1а область волновых чисел, соответствующая этому режиму, обозначена светло-серым цветом. Здесь спектр  $C_T(k, \omega)$ , как и в случае гидродинамического режима, имеет лишь единственную компоненту, располагающуюся на нулевой частоте и воспроизводимую лоренцевой функцией (см. выражение (27), рис. 1б). Ширина этой спектральной компоненты определяется обобщенной сдвиговой вязкостью  $\nu(k)$ , значения которой зависят от волнового числа  $k$ . При переходе к гидродинамическому пределу  $k \rightarrow 0$  величина  $\nu(k)$  экстраполируется в гидродинамическую кинематическую сдвиговую вязкость:

$$\nu = \lim_{k \rightarrow 0} \nu(k).$$

В этом режиме поперечная коллективная динамика частиц описывается гидродинамическими переменными  $A_1^T(k)$  и  $A_2^T(k)$ . Следовательно, выравнивание временных масштабов, задаваемое соотношением (34), происходит при  $l = 3$ :

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta_{T,3}^2(k)}} = \frac{1}{\sqrt{\Delta_{T,4}^2(k)}} = \frac{1}{\sqrt{\Delta_{T,5}^2(k)}} = \dots, \tag{51}$$

и данное равенство временных масштабов естественным образом реализует переход от расширенного набора переменных  $A_1^T(k)$ ,  $A_2^T(k)$  и  $A_3^T(k)$  к обычным гидродинамическим переменным  $A_1^T(k)$  и  $A_2^T(k)$ . С учетом (51) из (36а) получаем

$$C_T(k, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta_{T,2}^2(k) \sqrt{\Delta_{T,3}^2(k)}}{\Delta_{T,3}^2(k) - \Delta_{T,2}^2(k)} \frac{1}{\omega^2 + A_2^T(k)}, \tag{52a}$$

где

$$A_2^T(k) = \frac{\Delta_{T,2}^4(k)}{\Delta_{T,3}^2(k) - \Delta_{T,2}^2(k)}. \tag{52б}$$

Выражение (52а) характеризуется следующими свойствами. Во-первых, данное выражение определяет спектральную плотность  $C_T(k, \omega)$  в частотной области

$$\omega^2 \ll \Delta_{T,3}^2(k), \tag{53}$$

где  $\tau_{T,3}(k) = 1/\sqrt{\Delta_{T,3}^2(k)}$  есть наиболее короткий временной масштаб в коллективной динамике частиц при волновых числах, соответствующих режиму обобщенной гидродинамики.



Во-вторых, из выражения (52a) находим следующее соответствие между частотными параметрами:

$$\Delta_{T,3}^2(k) \geq \Delta_{T,2}^2(k), \quad (54)$$

которое аналогично соотношению (42) и которое, как и условие (53), отражает тот факт, что существующие колебательные процессы, соотносимые с поперечной коллективной динамикой частиц в обобщенном гидродинамическом режиме, характеризуются частотами, не превышающими значений величины  $\sqrt{\Delta_{T,3}^2(k)}$ .

В-третьих, выражение (52a) соответствует известному гидродинамическому выражению (27) для спектральной плотности поперечного потока  $C_T(k, \omega)$ , и коэффициент  $\mathcal{A}_2^T(k)$  соотносится с обобщенной сдвиговой вязкостью  $\nu(k)$ :

$$\nu(k) = \frac{1}{k^2} \sqrt{\mathcal{A}_2^T(k)} = \frac{1}{k^2} \frac{\Delta_{T,2}^2(k)}{\sqrt{\Delta_{T,3}^2(k) - \Delta_{T,2}^2(k)}}. \quad (55)$$

В-четвертых, выражение (52a) становится тождественным гидродинамическому выражению (27) при следующем соответствии между частотными параметрами:

$$\Delta_{T,3}^2(k) \gg \Delta_{T,2}^2(k), \quad (56)$$

которое эквивалентно предположению о разделении временных масштабов и марковскому приближению, которые используются в гидродинамической теории [43] и приводят к уравнению (25) и выражению (27) для  $C_T(k, \omega)$ .

### 3. ПОПЕРЕЧНАЯ КОЛЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА ЖИДКОГО ЛИТИЯ ВБЛИЗИ ТОЧКИ ПЛАВЛЕНИЯ

В работе [36] была представлена самосогласованная релаксационная теория продольной коллективной динамики частиц в простых жидкостях. В качестве примера было выполнено сопоставление теоретически рассчитанных спектров динамического структурного фактора  $S(k, \omega)$  и закона дисперсии  $\omega_c^{(L)}(k)$  продольных звуковых волн с экспериментальными данными по неупругому рассеянию рентгеновских лучей в жидком литии при температуре  $T = 475$  К (температура плавления  $T_m = 453.65$  К) [57]. Кроме того, в рамках теории были рассчитаны скорость распространения звука  $v^{(L)} = 6000 \pm 1200$  м/с, коэффициент затухания звука  $\Gamma^{(L)} = 18.4 \pm 3.5$  нм<sup>2</sup>/пс и температуропроводность  $D_T = 21.5 \pm 3.5$  нм<sup>2</sup>/пс. В настоящей работе выполнены количественные расчеты различных характеристик поперечной коллективной динамики также для жидкого лития при  $T = 475$  К и количественной плотности атомов  $\rho = 0.0445 \text{ \AA}^{-3}$ . Теоретические результаты мы будем сопоставлять с результатами моделирования равновесной атомарной динамики в  $NVT$ -ансамбле ( $N$  – число частиц,  $V$  – объем,  $T$  – температура) [58].

Детали моделирования аналогичны представленным в работах [36], [59]. Симуляционные расчеты выполнялись для системы  $N = 16000$  атомов, заключенных в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Взаимодействие между атомами лития задавалось через сферический псевдопотенциал [60]. Как было показано нами ранее [59], данная модель потенциала дает наилучшее согласие с экспериментальными данными по упругому и неупругому рассеянию рентгеновских лучей

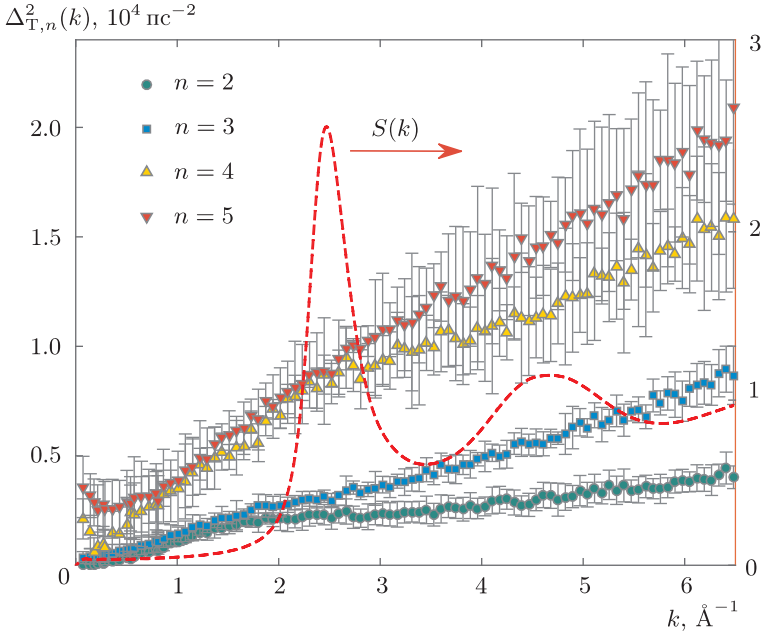


Рис. 2. Частотные релаксационные параметры  $\Delta_{T,2}^2(k)$ ,  $\Delta_{T,3}^2(k)$ ,  $\Delta_{T,4}^2(k)$  и  $\Delta_{T,5}^2(k)$  поперечной коллективной динамики атомов в равновесном расплаве лития при температуре  $T = 475$  К. Результаты получены на основе конфигурационных данных моделирования атомарной динамики. Вертикальными отрезками обозначены доверительные интервалы значений, которые получены в результате численных расчетов с конфигурационными данными в различные моменты времени. Штриховая линия – экспериментальный статический структурный фактор  $S(k)$  жидкого лития при данной температуре [62].

по сравнению с известными многочастичными потенциалами ЕАМ-типа<sup>2)</sup>. Интегрирование уравнений движений было выполнено по схеме Верлэ в скоростной форме с временным шагом  $\tau' = 10^{-14}$  с [61]. Для приведения системы в состояние термодинамического равновесия и расчета спектральных характеристик было выполнено 200 000 и 100 000 временных шагов соответственно.

На основе конфигурационных данных, представляющих собой массивы координат и скоростей атомов в произвольный фиксированный момент времени, были рассчитаны частотные моменты, а также частотные релаксационные параметры  $\Delta_{T,n}^2(k)$ ,  $n = 2, 3, 4, 5$ , для широкого диапазона волновых чисел  $k \in [0.072, 6.481] \text{ \AA}^{-1}$  (см. выражения (18) и (21)). Отметим, что базовое определение (18) и микроскопическое выражение (22) для частотного параметра  $\Delta_{T,2}^2(k)$  дают одинаковые результаты. Как видно из рис. 2, рассчитанные частотные параметры имеют монотонную и подобную зависимость от  $k$  в области волновых чисел  $k > 0.25 \text{ \AA}^{-1}$ . Как и ожидается, характерные временные масштабы  $\tau_{T,n}(k) = 1/\sqrt{\Delta_{T,n}^2(k)}$  укорачиваются с ростом волнового числа  $k$ . Наименьшие значения принимают  $\tau_{T,4}(k) = 1/\sqrt{\Delta_{T,4}^2(k)}$

<sup>2)</sup>Модель погруженного атома (от английского “embedded atom model”).

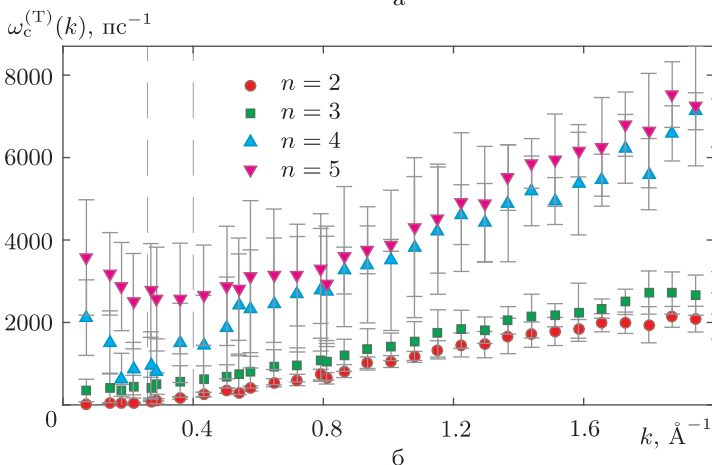
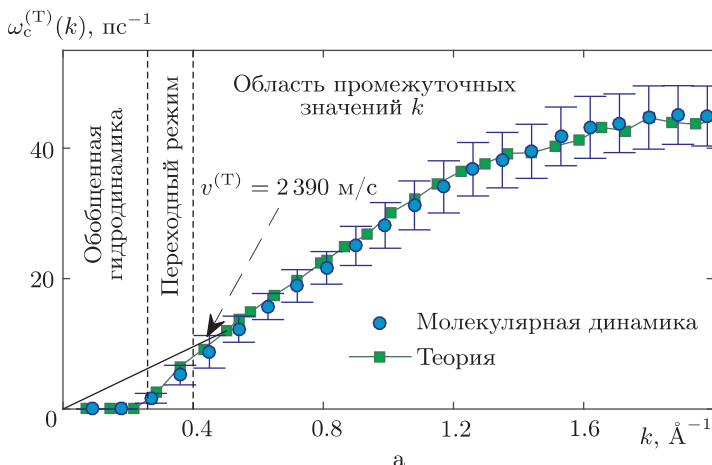


Рис. 3. Закон дисперсии поперечной колебательной динамики атомов равновесного расплава лития при температуре  $T = 475$  К (а). Кружки – данные моделирования атомарной динамики; квадраты, соединенные сплошной линией, – результаты теоретических расчетов с уравнением (436); прямая линия в области малых волновых чисел – экстраполированный гидродинамический результат  $\omega_c^{(T)}(k) = v^{(T)}k$ , где  $v^{(T)} = 2390$  м/с – скорость поперечного звука. Увеличенный фрагмент рис. 2 – частотные релаксационные параметры  $\Delta_{T,2}^2(k)$ ,  $\Delta_{T,3}^2(k)$ ,  $\Delta_{T,4}^2(k)$  и  $\Delta_{T,5}^2(k)$  в области малых конечных значений волнового числа (б). Вертикальные штриховые линии разделяют различные режимы в колебательной динамике.

и  $\tau_{T,5}(k) = 1/\sqrt{\Delta_{T,5}^2(k)}$ , определяя временные масштабы менее  $10^{-14}$  с. Такие временные масштабы являются более короткими даже по сравнению с шагом интегрирования  $\tau'$  уравнений движения атомов в симуляционных расчетах. Таким образом, время  $\tau_{T,4}(k)$  действительно может рассматриваться в качестве некоторой пороговой величины в иерархии временных масштабов релаксационных процессов [53]. В диапазоне волновых чисел  $k \leq 3.5 \text{ \AA}^{-1}$  частотные параметры  $\Delta_{T,4}^2(k)$  и  $\Delta_{T,5}^2(k)$  принимают сопоставимые значения и демонстрируют расхождение лишь с последующим

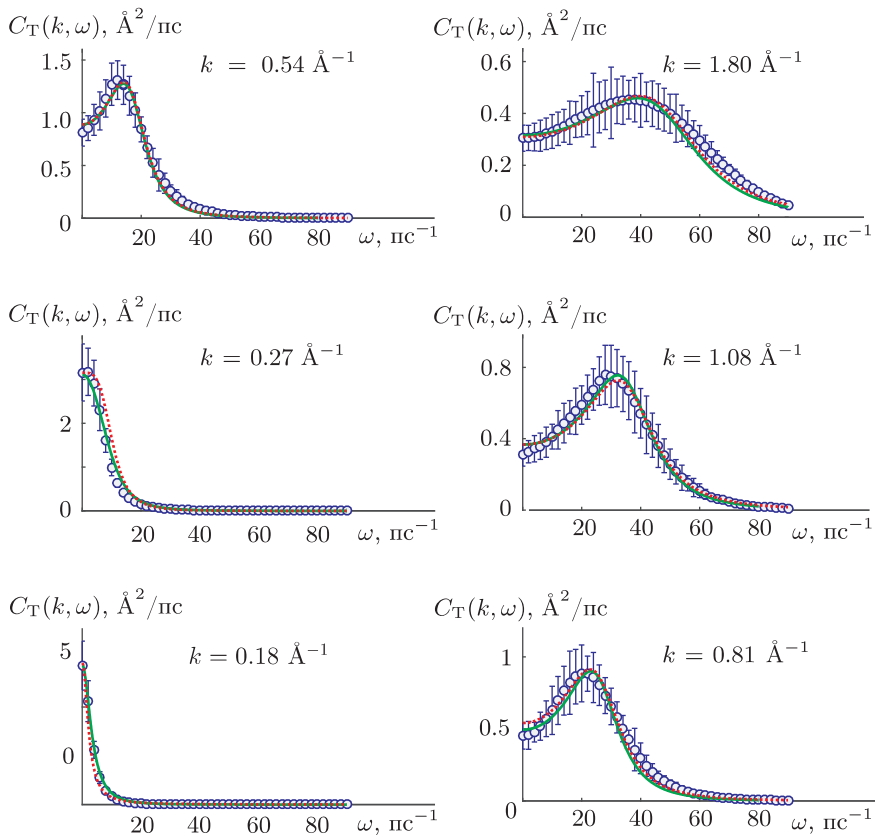


Рис. 4. Спектры поперечного потока  $C_T(k, \omega)$  расплава лития при температуре  $T = 475$  К при различных волновых числах. Кружки – данные моделирования атомарной динамики; сплошная линия – теоретические результаты с общим выражением (36a); пунктирная линия – теоретические результаты с выражениями для различных режимов: выражение (52a) для спектра при  $k = 0.18 \text{ \AA}^{-1}$ , выражение (50) для спектра при  $k = 0.27 \text{ \AA}^{-1}$ , выражение (41) для спектров при  $k = 0.54 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $0.81 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $1.08 \text{ \AA}^{-1}$  и  $1.80 \text{ \AA}^{-1}$ .

ростом волнового числа  $k$ , устремляясь к соответствию (37), характерному для режима свободно движущейся частицы.

Полученные значения частотных релаксационных параметров позволили на основе выражения (436) рассчитать закон дисперсии  $\omega_c^{(T)}(k)$  поперечной колебательной динамики. Как видно из рис. 3, теоретическое выражение для закона дисперсии полностью воспроизводит результаты моделирования. При этом на графике  $\omega_c^{(T)}(k)$  отчетливо распознаются характерные режимы коллективной колебательной динамики в расплаве лития при данной температуре. Так, режим *обобщенной гидродинамики* соответствует малым значениям волнового числа  $k \leq 0.25 \text{ \AA}^{-1}$ , *переходный режим* реализуется на интервале  $0.25 \text{ \AA}^{-1} < k < 0.4 \text{ \AA}^{-1}$  и *область промежуточных значений* волнового числа  $k$ , на которой проявляются сдвиговые колебательные процессы, располагается при  $k \geq 0.4 \text{ \AA}^{-1}$ .

На рис. 4 демонстрируется сопоставление спектров  $C_T(k, \omega)$ , полученных на основе данных моделирования атомарной динамики и рассчитанных согласно общему выражению (36а). Здесь же приводятся теоретические спектры  $C_T(k, \omega)$ , рассчитанные по формулам (52а), (50) и (41) для соответствующих характерных режимов коллективной динамики атомов лития. Как видно из рисунка, теоретические результаты полностью согласуются с результатами моделирования: теория воспроизводит все особенности спектров  $C_T(k, \omega)$  при различных волновых числах, корректно воспроизводит переход от динамики с выраженной высокочастотной колебательной модой (см. на рис. 4 спектры  $C_T(k, \omega)$  при волновых числах от  $k = 0.54 \text{ \AA}^{-1}$  до  $k = 1.80 \text{ \AA}^{-1}$ ) к обычной жидкостной поперечной коллективной динамике (см. спектр  $C_T(k, \omega)$  при  $k = 0.18 \text{ \AA}^{-1}$  на рис. 4).

На основе выражений (46б) и (47) определены скорость поперечного звука  $v^{(T)} \simeq 2390 \text{ м/с}$  и коэффициент затухания поперечной звуковой моды  $\Gamma^{(T)} \simeq 17 \text{ \AA}^2/\text{пс}$ . Численные расчеты с выражением (55) обнаруживают, что обобщенная кинематическая сдвиговая вязкость имеет следующую зависимость от  $k$ :

$$\nu(k) = \frac{\nu}{1 + \alpha^2 k^2}, \quad (57)$$

где коэффициент  $\alpha$  и кинематическая сдвиговая вязкость  $\nu$  принимают значения  $\alpha = 1.1$  и  $\nu = 105 \pm 11 \text{ \AA}^2/\text{пс}$ . Примечательно, что полученное значение вязкости хорошо согласуется с экспериментальным:  $\nu_{\text{exp}} = 111 \text{ \AA}^2/\text{пс}$  [63].

#### 4. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ КОММЕНТАРИИ

В качестве заключения отметим следующие моменты.

Представленная самосогласованная релаксационная теория поперечной коллективной динамики частиц в равновесных жидкостях представляет собой реализацию идеи Н. Н. Боголюбова о сокращенном описании релаксационных процессов в жидкостях. Данная теория полностью согласуется с теоретическим описанием продольной коллективной динамики в жидкостях, которое ранее детально излагалось в работах [36], [52], [64]. Подобное последовательное, хотя и более упрощенное описание до сих пор могло осуществляться лишь в рамках вязкоупругой модели [65].

Теория дает верную асимптотику как в коротковолновом пределе, соответствующем свободному движению частиц, так и в длинноволновом гидродинамическом пределе и позволяет рассчитывать гидродинамические характеристики. Ключевое условие об определенном соответствии между временными масштабами релаксационных процессов в жидкостях дает возможность в рамках представленного теоретического описания учитывать наличие быстропротекающих процессов, которые в гидродинамической теории и некоторых ее обобщениях, как правило, игнорируются. Теория удовлетворяет полному набору так называемых “правил сумм” спектральной плотности  $C_T(k, \omega)$ . Она обобщает известную вязкоупругую модель [65], ключевые параметры которой могут быть рассчитаны в рамках представленной теории (см. также раздел 3.1 в работе [36]).

В данной теории не используются предположения о том, что какие-то конкретные “релаксирующие” и “колебательные” режимы (моды) формируют те или иные особенности поперечной коллективной динамики частиц, определяющие в свою очередь отдельные участки спектральной плотности  $C_T(k, \omega)$  поперечного потока частиц.

Поэтому для осуществления интерпретации экспериментально измеренной или рассчитанной путем моделирования спектральной плотности совершенно не требуется, чтобы какие-либо компоненты этой спектральной плотности были разделенными, изолированными.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Я. И. Френкель, *Кинетическая теория жидкостей*, Наука, Л., 1975.
- [2] А. М. Прохоров, Д. М. Алексеев, А. М. Бонч-Бруевич, А. С. Боровик-Романов и др. (ред.), *Физический энциклопедический словарь*, Сов. энциклопедия, М., 1983.
- [3] А. М. Прохоров, Д. М. Алексеев, А. М. Балдин, А. М. Бонч-Бруевич, А. С. Боровик-Романов и др. (ред.), *Физическая энциклопедия*, т. II, Большая Российская энциклопедия, М., 1998.
- [4] K. Trachenko, V. V. Brazhkin, “Collective modes and thermodynamics of the liquid state”, *Rep. Prog. Phys.*, **79**:1 (2016), 016502, 36 pp., arXiv: 1512.06592.
- [5] Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, В. Н. Рыжов, “Закритические аномалии и линия Видома для изоструктурного фазового перехода в твердом теле”, *ТМФ*, **194**:1 (2018), 175–184.
- [6] A. V. Granato, “The Shear Modulus of Liquids”, *J. Phys. IV France*, **06**:C8 (1996), C8-1–C8-9, 9 pp.
- [7] D. Levesque, L. Verlet, J. K urkijarvi, “Computer ‘experiments’ on classical fluids. IV. Transport properties and time-correlation functions of the Lennard-Jones liquid near its triple point”, *Phys. Rev. A*, **7**:5 (1973), 1690–1700.
- [8] L. Sj ogren, “Kinetic theory of classical liquids. III. Numerical results on the transverse current correlation in liquid argon”, *Ann. Phys.*, **110**:1 (1978), 173–179.
- [9] Z. Donk o, G. J. Kalman, P. Hartmann, “Dynamical correlations and collective excitations of Yukawa liquids”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **20**:41 (2008), 413101, 35 pp.
- [10] S. A. Khrapak, A. G. Khrapak, N. P. Kryuchkov, S. O. Yurchenko, “Onset of transverse (shear) waves in strongly-coupled Yukawa fluids”, *J. Chem. Phys.*, **150**:10 (2019), 104503, 8 pp., arXiv: 1902.09874.
- [11] R. E. Ryltsev, N. M. Chtchelkatchev, V. N. Ryzhov, “Superfragile glassy dynamics of a one-component system with isotropic potential: competition of diffusion and frustration”, *Phys. Rev. Lett.*, **110**:2 (2013), 025701, 5 pp., arXiv: 1301.2162.
- [12] B. G. del Rio, L. E. Gonz alez, “Longitudinal, transverse, and single-particle dynamics in liquid Zn: Ab initio study and theoretical analysis”, *Phys. Rev. B*, **95**:22 (2017), 224201, 15 pp.
- [13] N. Jakse, T. Bryk, “Pressure evolution of transverse collective excitations in liquid Al along the melting line”, *J. Chem. Phys.*, **151**:3 (2019), 034506, 8 pp.
- [14] M. Ropo, J. Akola, R. O. Jones, “Collective excitations and viscosity in liquid Bi”, *J. Chem. Phys.*, **145**:18 (2016), 184502, 8 pp.
- [15] Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, V. V. Brazhkin, “Anomalous behavior of dispersion of longitudinal and transverse collective excitations in water”, *J. Mol. Liq.*, **287** (2019), 110992, 4 pp.
- [16] L. Wang, C. Yang, M. T. Dove, A. V. Mokshin, V. V. Brazhkin, K. Trachenko, “The nature of collective excitations and their crossover at extreme supercritical conditions”, *Sci. Rep.*, **9** (2019), 755, 9 pp., arXiv: 1901.10052.
- [17] S. Hosokawa, M. Inui, Y. Kajihara, S. Tsutsui, A. Q. R. Baron, “Transverse excitations in liquid Fe, Cu and Zn”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **27**:19 (2015), 194104, 7 pp.

- [18] P. A. Egelstaff, *An Introduction to the Liquid State*, Academic Press, New York, 1967.
- [19] E. Burkel, H. Sinn, “Inelastic X-ray scattering: a new technique for studying dynamics in liquids”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **6**:23A (1994), A225–A228.
- [20] S. Hosokawa, M. Inui, Y. Kajihara, K. Matsuda, T. Ichitsubo, W.-C. Pilgrim, H. Sinn, L. E. González, D. J. González, S. Tsutsui, A. Q. R. Baron, “Transverse acoustic excitations in liquid Ga”, *Phys. Rev. Lett.*, **102**:10 (2009), 105502, 4 pp.
- [21] S. Hosokawa, S. Munejiri, M. Inui, Y. Kajihara, W.-C. Pilgrim, Y. Ohmasa, S. Tsutsui, A. Q. R. Baron, F. Shimojo, K. Hoshino, “Transverse excitations in liquid Sn”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **25**:11 (2013), 112101, 5 pp.
- [22] V. M. Giordano, G. Monaco, “Fingerprints of order and disorder on the high-frequency dynamics of liquids”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **107**:51 (2010), 21985–21989.
- [23] V. M. Giordano, G. Monaco, “Inelastic x-ray scattering study of liquid Ga: implications for the short-range order”, *Phys. Rev. B*, **84**:5 (2011), 052201, 4 pp.
- [24] R. A. MacPhail, D. Kivelson, “Generalized hydrodynamic theory of viscoelasticity”, *J. Chem. Phys.*, **80**:5 (1984), 2102–2114.
- [25] T. Bryk, I. Mryglod, “Generalized hydrodynamics of binary liquids: transverse collective modes”, *Phys. Rev. E*, **62**:2 (2000), 2188–2199.
- [26] I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, “Generalized collective modes of a Lennard-Jones fluid. High mode approximation”, *Condens. Matter Phys.*, **4** (1994), 128–160.
- [27] K. Trachenko, “Lagrangian formulation and symmetrical description of liquid dynamics”, *Phys. Rev. E*, **96**:6 (2017), 062134, 5 pp., arXiv: 1710.01390.
- [28] M. Baggioli, M. Vasin, V. Brazhkin, K. Trachenko, “Gapped momentum states”, *Phys. Rep.*, **865** (2020), 1–44, arXiv: 1904.01419.
- [29] N. P. Kryuchkov, L. A. Mistryukova, V. V. Brazhkin, S. O. Yurchenko, “Excitation spectra in fluids: how to analyze them properly”, *Sci. Rep.*, **9** (2019), 10483, 12 pp.
- [30] N. P. Kryuchkov, V. V. Brazhkin, S. O. Yurchenko, “Anticrossing of longitudinal and transverse modes in simple fluids”, *J. Phys. Chem. Lett.*, **10**:15 (2019), 4470–4475.
- [31] E. V. Yakovlev, N. P. Kryuchkov, P. V. Ovcharov, A. V. Sapelkin, V. V. Brazhkin, S. O. Yurchenko, “Direct experimental evidence of longitudinal and transverse mode hybridization and anticrossing in simple model fluids”, *J. Phys. Chem. Lett.*, **11**:4 (2020), 1370–1376.
- [32] Yu. D. Fomin, V. N. Ryzhov, E. N. Tsiok, V. V. Brazhkin, K. Trachenko, “Corrigendum: Crossover of collective modes and positive sound dispersion in supercritical state”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **29**:5 (2017), 059501, 1 pp.
- [33] V. V. Brazhkin, Yu. D. Fomin, V. N. Ryzhov, E. N. Tsiok, K. Trachenko, “Liquid-like and gas-like features of a simple fluid: an insight from theory and simulation”, *Phys. A*, **509** (2018), 690–702.
- [34] R. M. Yulmetyev, A. V. Mokshin, P. Hänggi, V. Yu. Shurygin, “Time-scale invariance of relaxation processes of density fluctuation in slow neutron scattering in liquid cesium”, *Phys. Rev. E*, **64**:5 (2001), 057101, 4 pp., arXiv: cond-mat/0111467.
- [35] R. M. Yul’met’ev, A. V. Mokshin, P. Hänggi, V. Yu. Shurygin, “Dynamic structure factor in liquid cesium on the basis of time-scale invariance of relaxation processes”, *Письма в ЖЭТФ*, **76**:3 (2002), 181–184.
- [36] A. V. Mokshin, B. N. Galimzyanov, “Self-consistent description of local density dynamics in simple liquids. The case of molten lithium”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **30**:8 (2018), 085102, 17 pp., arXiv: 1801.04879.
- [37] R. M. Yulmetyev, A. V. Mokshin, T. Scopigno, P. Hänggi, “New evidence for the idea of timescale invariance of relaxation processes in simple liquids: the case of molten sodium”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **15**:14 (2003), 2235–2257.

- [38] A. V. Mokshin, R. M. Yulmetyev, P. Hänggi, “Relaxation time scales in collective dynamics of liquid alkali metals”, *J. Chem. Phys.*, **121**:15 (2004), 7341–7346, arXiv: cond-mat/0506636.
- [39] А. В. Мокшин, Р. М. Юльметьев, Р. М. Хуснутдинов, П. Хангги, “Коллективная динамика жидкого алюминия вблизи температуры плавления: теория и компьютерное моделирование”, *ЖЭТФ*, **130**:6 (2006), 974–983.
- [40] A. V. Mokshin, R. M. Yulmetyev, R. M. Khusnutdinoff, P. Hänggi, “Analysis of the dynamics of liquid aluminium: recurrent relation approach”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **19**:4 (2007), 046209, 16 pp.
- [41] R. M. Khusnutdinoff, C. Cockrell, O. A. Dicks, A. C. S. Jensen, M. D. Le, L. Wang, M. T. Dove, A. V. Mokshin, V. V. Brazhkin, K. Trachenko, “Collective modes and gapped momentum states in liquid Ga: experiment, theory, and simulation”, *Phys. Rev. B*, **101**:21 (2020), 214312, 9 pp., arXiv: 2005.00470.
- [42] В. Н. Рьжов, А. Ф. Барабанов, М. В. Магницкая, Е. Е. Тарева, “Теоретические исследования конденсированных сред”, *УФН*, **178**:10 (2008), 1118–1124.
- [43] J.-P. Hansen, I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, Academic Press, London, 2006.
- [44] R. Zwanzig, *Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Oxford Univ. Press, Oxford, 2001.
- [45] А. В. Мокшин, Р. М. Юльметьев, *Микроскопическая динамика простых жидкостей*, Центр инновационных технологий, Казань, 2006.
- [46] Б. А. Клузов, “О критериях плавления комплексной плазмы”, *УФН*, **180**:10 (2010), 1095–1108.
- [47] U. Balucani, M. H. Lee, V. Tognetti, “Dynamical correlations”, *Phys. Rep.*, **373**:6 (2003), 409–492.
- [48] М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики*, т. 1: *Функциональный анализ*, Мир, М., 1977.
- [49] А. А. Владимиров, Д. Иле, Н. М. Плакида, “Динамическая спиновая восприимчивость в  $t$ - $J$ -модели: метод функции памяти”, *ТМФ*, **145**:2 (2005), 240–255.
- [50] M. H. Lee, “Generalized Langevin equation and recurrence relations”, *Phys. Rev. E*, **62**:2 (2000), 1769–1772.
- [51] A. V. Mokshin, R. M. Yulmetyev, P. Hänggi, “Simple measure of memory for dynamical processes described by a generalized Langevin equation”, *Phys. Rev. Lett.*, **95**:20 (2005), 200601, 4 pp., arXiv: cond-mat/0511308.
- [52] А. В. Мокшин, “Самосогласованный подход к описанию релаксационных процессов в классических многочастичных системах”, *ТМФ*, **183**:1 (2015), 3–35.
- [53] Н. Н. Боголюбов, *Проблемы динамической теории в статистической физике*, Гостехиздат, М.–Л., 1946.
- [54] W. Götze, *Complex Dynamics of Glass-Forming Liquids: A Mode-Coupling Theory*, International Series of Monographs on Physics, **143**, Oxford Univ. Press, Oxford, 2012.
- [55] П. Резибуа, М. Де Ленер, *Классическая кинетическая теория жидкостей и газов*, М., Мир, 1980.
- [56] R. Mountain, “Spectral distribution of scattered light in a simple fluid”, *Rev. Modern Phys.*, **38**:1 (1966), 205–214.
- [57] T. Scopigno, U. Balucani, G. Ruocco, F. Sette, “Density fluctuations in molten lithium: inelastic x-ray scattering study”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **12**:37 (2000), 8009–8034.
- [58] И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, “Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло”, *УФН*, **169**:7 (1999), 773–795.
- [59] Р. М. Хуснутдинов, Б. Н. Галимзянов, А. В. Мокшин, “Динамика атомов жидкого лития. Псевдопотенциал и потенциалы ЕАМ-типа”, *ЖЭТФ*, **153**:1 (2018), 100–107.



- [60] L. E. González, D. J. González, M. Silbert, J. A. Alonso, “A theoretical study of the static structure and thermodynamics of liquid lithium”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **5**:26 (1993), 4283–4298.
- [61] А. В. Мокшин, А. В. Чванова, Р. М. Хуснутдинов, “Приближение взаимодействующих мод в дробно-степенном обобщении. Динамика частиц в переохлажденных жидкостях и стеклах”, *ТМФ*, **171**:1 (2012), 135–149.
- [62] Y. Waseda, *The Structure of Non-Crystalline Materials: Liquids and Amorphous Solids*, McGraw-Hill, New York, 1980.
- [63] R. W. Ohse (ed.), *Handbook of Thermodynamic and Transport Properties of Alkali Metals*, Chemical Data Series, **30**, Blackwell Sci., Oxford, 1985.
- [64] A. V. Mokshin, B. N. Galimzyanov, “Corrigendum: Self-consistent description of local density dynamics in simple liquids. The case of molten lithium”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **31**:20 (2019), 209501, 1 pp.
- [65] J. R. D. Copley, S. W. Lovesey, “The dynamic properties of monatomic liquids”, *Rep. Prog. Phys.*, **38**:4 (1975), 461–563.

Поступила в редакцию 2.08.2020,  
после доработки 20.08.2020,  
принята к публикации 21.08.2020