

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

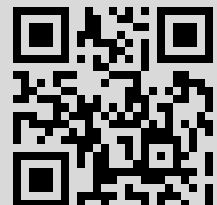
В. Ю. Шурыгин, Р. М. Юльметьев, Влияние немарковских эффектов в тепловом движении частиц на интенсивность некогерентного рассеяния медленных нейтронов в жидкости, *ТМФ*, 1990, том 83, номер 2, 222–235

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: 188.225.7.16

5 сентября 2017 г., 17:40:53



© 1990 г.

В. Ю. Шурыгин, Р. М. Юльметьев

ВЛИЯНИЕ НЕМАРКОВСКИХ ЭФФЕКТОВ В ТЕПЛОМ ДВИЖЕНИИ ЧАСТИЦ НА ИНТЕНСИВНОСТЬ НЕКОГЕРЕНТНОГО РАССЕЯНИЯ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ В ЖИДКОСТИ

Для выяснения роли немарковских эффектов в процессе некогерентного рассеяния медленных нейтронов на основе идеи Боголюбова о сокращенном описании многочастичных систем рассмотрена кинетика флуктуаций локальной плотности отдельного атома жидкости. Методом проекционных операторов Мори построены точные кинетические уравнения для временной корреляционной функции флуктуаций плотности и функции памяти. С помощью другой фундаментальной идеи Боголюбова об иерархии времен релаксации найдены приближенные решения полученных уравнений в длинновременном приближении. На основе этих решений предложено несколько способов вычисления закона некогерентного рассеяния $S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega)$ для различных режимов молекулярной релаксации. Показано, что процессы релаксации, ответственные за некогерентное рассеяние, являются существенно немарковскими. Численные расчеты проведены для $S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega)$ жидкого аргона при температуре $T=85,2^\circ\text{K}$ и значениях волнового вектора \mathbf{k} от 1 до 3 \AA^{-1} . В приближении, основанном на учете функции памяти второго порядка, получено хорошее согласие развитой теории с экспериментом по некогерентному рассеянию нейтронов.

I. Вопрос о справедливости описания релаксационных явлений в статистических системах с помощью марковских процессов относится к одной из наиболее важных проблем статистической физики [1, 2]. В частности, Крыловым [1] было показано, что «...в размешивающихся системах, при вполне естественных и тесно примыкающих к свойствам размешивания дополнительных динамических предположениях, процесс релаксации с достаточной степенью точности будет описываться с помощью цепей Маркова...» [1, с. 111].

Между тем во многих разделах современной молекулярной спектроскопии для разрешения этого важного вопроса накоплен достаточный материал. В частности, богатый экспериментальный материал к настоящему времени имеется в исследовании некогерентного рассеяния медленных нейтронов в жидкостях (см., например, [3–13]). Кроме того, детальную дополнительную информацию об особенностях такого рассеяния дают исследования, выполняемые методом молекулярной динамики [14–16]. Для интерпретации полученной информации о некогерентном рассеянии построено несколько теорий, основанных на различных подходах [17–33]. Во многих работах используется метод, основанный на так называемой ширинной функции, пропорциональной среднеквадратичному смещению отдельного атома [17–20]. Для этой функции исполь-

зовалось гауссово [17–19] и другие феноменологические приближения [20]. В работах [21, 22] применялась модель самосогласованного поля, в [23–26] — метод кинетических уравнений для одночастичной функции распределения. Однако во всех этих теориях немарковские эффекты в тепловом движении частиц жидкости совершенно не учитывались. Первые, но не вполне последовательные попытки учета немарковских эффектов были предприняты в работах [27–33] посредством применения к описанию некогерентного рассеяния нейтронов в жидкостях метода проекционных операторов Мори [34, 35]. Несмотря на значительное число теоретических работ в этой области их результаты нельзя считать удовлетворительными. Дело в том, что в них используются различные феноменологические модели теплового движения частиц в жидкости, необоснованные предположения о временной зависимости неизвестных функций, а также большое количество подгоночных констант.

В настоящей работе для последовательного учета немарковских эффектов в некогерентном рассеянии медленных нейтронов в жидкостях применяется метод Мори [34, 35]. Однако в отличие от [27–33] он используется нами не формально, а в рамках реализации идеи Боголюбова о сокращенном описании многочастичных систем [36, 37]. Кроме этого, здесь подробно используется фундаментальная идея Боголюбова об иерархии времен релаксации для описания молекулярных процессов в жидкостях. Конечные выражения для закона некогерентного рассеяния существенно учитывают немарковские временные эффекты и зависят от режима релаксации молекулярных переменных жидкости. В последнем разделе развитая теория сопоставляется с экспериментальными данными для жидкого аргона [9] и делаются выводы о существенной роли немарковских эффектов в формировании большого числа релаксационных режимов в жидкости.

II. Рассмотрим простую классическую жидкость, описываемую ливиллианом

$$(1) \quad \hat{L}_F = \sum_{j=1}^N \frac{\mathbf{p}_j \nabla_j}{m} - \sum_{i>j=1}^N \nabla_i u(i, j) (\nabla_{\mathbf{p}_i} - \nabla_{\mathbf{p}_j}),$$

где m — масса атома, \mathbf{p}_j — импульс j -го атома, $u(i, j)$ — парный потенциал взаимодействия частиц с номерами i и j .

В качестве динамической переменной возьмем флуктуации локальной плотности избранного атома с волновым вектором \mathbf{k}

$$(2) \quad n_{\mathbf{k}}(t) = \frac{1}{V} \exp[i\mathbf{k}\mathbf{r}_1(t)],$$

где индексом 1 обозначен выбранный атом.

Рассмотрим нормированную временную корреляционную функцию (ВКФ) флуктуаций плотности избранной частицы

$$(3) \quad n(\mathbf{k}, t) = \langle n_{\mathbf{k}}^*(0) n_{\mathbf{k}}(t) \rangle / \langle |n_{\mathbf{k}}(0)|^2 \rangle.$$

Зная ВКФ $n(\mathbf{k}, t)$, можно определить закон некогерентного рассеяния

медленных нейтронов $S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega)$ следующим образом [33]:

$$(4) \quad S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \left[\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \tilde{n}(\mathbf{k}, i\omega + \varepsilon) \right],$$

$$\tilde{n}(\mathbf{k}, s) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} n(\mathbf{k}, t).$$

Отметим, что величина $S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega)$ связана с дважды дифференциальным сечением рассеяния [38]

$$(5) \quad \frac{d^2 \sigma}{d\Omega d\omega} = N a_{\text{inc}} \frac{k}{k_0} S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega),$$

где N — число рассеивающих центров, a_{inc} — длина некогерентного рассеяния, $\hbar\omega$ и $\hbar\mathbf{k}$ — энергия и импульс, передаваемые частицам жидкости в отдельном акте рассеяния, \mathbf{k}_0 — волновой вектор падающего нейтрона.

Для анализа ВКФ $n(\mathbf{k}, t)$, следуя методу проекционных операторов Мори [34, 35], а также [39], построим точное кинетическое уравнение

$$(6) \quad \frac{dn(\mathbf{k}, t)}{dt} = - \int_0^t d\tau M(\mathbf{k}, \tau) n(\mathbf{k}, t-\tau),$$

$$M(\mathbf{k}, \tau) = \frac{\langle (\mathbf{p}_1 \mathbf{k}) n_{\mathbf{k}}^*(0) \exp(\hat{L}_{22}\tau) (\mathbf{p}_1 \mathbf{k}) n_{\mathbf{k}}(0) \rangle}{m^2 \langle |n_{\mathbf{k}}(0)|^2 \rangle}$$

$$\hat{L}_{22} = P_n \hat{L}_F P_n, \quad P_n = 1 - \Pi_n, \quad \Pi_n = \frac{n_{\mathbf{k}}(0) \langle n_{\mathbf{k}}^*(0) \rangle}{\langle |n_{\mathbf{k}}(0)|^2 \rangle}.$$

Отметим, что в (6) немарковские эффекты строго учитываются посредством функции памяти $M(\mathbf{k}, \tau)$.

Использовать далее само уравнение (6) неудобно, т. к. временная эволюция входящих в (6) ВКФ определяется усеченным оператором Лиувилля \hat{L}_{22} . Для того чтобы избавиться от этого и перейти к обычному лиувиллиану \hat{L}_F , следуя [39], воспользуемся известным тождеством Кубо для произвольных операторов \hat{A} и \hat{B} [2]

$$(7) \quad e^{\alpha(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\alpha\hat{A}} + \int_0^{\alpha} d\beta e^{(\alpha-\beta)\hat{A}} \hat{B} e^{\beta(\hat{A}+\hat{B})}.$$

Полагая $\hat{A} = \hat{L}_F$, $\hat{B} = \hat{L}_{22} - \hat{L}_F$, для ядра $M(\mathbf{k}, \tau)$ получаем точное разложение

$$(8) \quad M(\mathbf{k}, \tau) = \omega_n^2 M_0(\mathbf{k}, \tau) + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \int_0^{\tau} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots$$

$$\dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n n'(\mathbf{k}, \tau - \tau_1) n'(\mathbf{k}, \tau_1 - \tau_2) \dots n'(\mathbf{k}, \tau_{n-1} - \tau_n) n''(\mathbf{k}, \tau_n),$$

где новое ядро $M_0(\mathbf{k}, \tau)$ само является нормированной ВКФ

$$M_0(\mathbf{k}, \tau) = \langle (\mathbf{p}_1 \mathbf{k}) n_{\mathbf{k}}^*(0) \exp(\hat{L}_F \tau) (\mathbf{p}_1 \mathbf{k}) n_{\mathbf{k}}(0) \rangle V^2 / \langle (\mathbf{p}_1 \mathbf{k})^2 \rangle$$

с обычным оператором Лиувилля,

$$\omega_n^2 = \frac{1}{m^2} \langle (\mathbf{p}_1 \mathbf{k})^2 \rangle,$$

а штрих обозначает производную по времени. После применения преобразования Лапласа ряд (8) имеет вид

$$(9) \quad \bar{M}(\mathbf{k}, s) = \omega_n^2 \bar{M}_0(\mathbf{k}, s) + s \sum_{n=1}^{\infty} \{1 - s \bar{n}(\mathbf{k}, s)\}^{n+1},$$

$$\bar{M}(\mathbf{k}, s) = \int_0^{\infty} d\tau e^{-s\tau} M(\mathbf{k}, \tau), \quad \bar{n}(\mathbf{k}, s) = \int_0^{\infty} d\tau e^{-s\tau} n(\mathbf{k}, \tau).$$

В дальнейшем мы ограничимся случаем малых $s \rightarrow 0$, т. е. случаем больших времен $t \rightarrow \infty$. Тогда вместо (6) получаем

$$(10) \quad \frac{dn(\mathbf{k}, t)}{dt} = -\omega_n^2 \int_0^t d\tau M_0(\mathbf{k}, \tau) n(\mathbf{k}, t-\tau).$$

Предположим, что временные корреляции функций пространственных переменных и импульсов частиц происходят на существенно различных временных масштабах τ_q и τ_p . Времена релаксации τ_q и τ_p определим следующим образом:

$$(11) \quad \tau_q = \text{Re} \int_0^{\infty} d\tau n(\mathbf{k}, \tau), \quad \tau_p = \text{Re} \int_0^{\infty} d\tau \pi(\tau),$$

$$\pi(\tau) = \langle \mathbf{k} \mathbf{p}(0) \mathbf{k} \mathbf{p}(\tau) \rangle / \langle |\mathbf{k} \mathbf{p}(0)|^2 \rangle.$$

В последующем под временами релаксации всех встречающихся ВКФ будем понимать времена релаксации, определяемые аналогично (11). В данном случае, следуя идее Боголюбова об иерархии времен релаксации, в функции памяти $M_0(\mathbf{k}, \tau)$ можно выполнить частичное расцепление. Тогда при существенно разных масштабах τ_q и τ_p вместо (10) получаем

$$(12) \quad \frac{dn(\mathbf{k}, t)}{dt} = -\omega_n^2 \int_0^t d\tau \pi(\tau) n(\mathbf{k}, \tau) n(\mathbf{k}, t-\tau).$$

Основываясь на идее об иерархии времен релаксации и следуя [39], рассмотрим теперь различные случаи соотношения времен релаксации ВКФ $\pi(\tau)$ и $n(\mathbf{k}, \tau)$ — τ_p и τ_q .

1. $\tau_p \ll \tau_q$ — быстрая релаксация импульсов. Релаксация координатной части ВКФ $M_0(\mathbf{k}, \tau)$ происходит гораздо медленнее ее импульсной части, и можно положить $M_0(\mathbf{k}, \tau) \approx \pi(\tau)$. Тогда, решая (10) с помощью преобразования Лапласа, получаем

$$(13) \quad \bar{n}(\mathbf{k}, s) = \{s + \omega_n^2 \bar{\pi}(s)\}^{-1}, \quad \bar{\pi}(s) = \int_0^{\infty} d\tau e^{-s\tau} \pi(\tau).$$

2. $\tau_p \gg \tau_q$ — медленная релаксация импульсов (впервые введенное в [39] так называемое корреляционное приближение). В данном случае временная зависимость $M_0(\mathbf{k}, \tau)$ определяется только пространственными корреляциями атомов, и с достаточной степенью точности можно положить $M_0(\mathbf{k}, \tau) \approx n(\mathbf{k}, \tau)$. Тогда решение уравнения (10) приобретает следующий вид:

$$(14) \quad \tilde{n}(\mathbf{k}, s) = \frac{1}{2\omega_n^2} \{-s \pm \sqrt{s^2 + 4\omega_n^2}\}.$$

3. $\tau_p \sim \tau_q$. В этом случае релаксация как импульсной, так и координатной части $M_0(\mathbf{k}, \tau)$ происходит на одном временном интервале, и простого решения уравнения (10) не существует. Для определения временной эволюции $M_0(\mathbf{k}, \tau)$ снова воспользуемся методом проекционных операторов. Учитывая явный вид ВКФ $M_0(\mathbf{k}, \tau)$, для анализа уравнения (10) проекторы возьмем в следующем виде:

$$(15) \quad \Pi_{\mathbf{k}} = \frac{\langle \mathbf{p}_1 \mathbf{k} | n_{\mathbf{k}}(0) \rangle \langle \mathbf{p}_1 \mathbf{k} | n_{\mathbf{k}}^*(0) \rangle}{\langle (\mathbf{p}_1 \mathbf{k})^2 \rangle} V^2, \quad P_{\mathbf{k}} = 1 - \Pi_{\mathbf{k}}.$$

Тогда, следуя [39], для $M_0(\mathbf{k}, t)$ получаем следующее точное кинетическое уравнение:

$$(16) \quad \frac{dM_0(\mathbf{k}, t)}{dt} = - \int_0^t d\tau M_1(\mathbf{k}, \tau) M_0(\mathbf{k}, t-\tau),$$

где введена функция памяти второго порядка

$$\begin{aligned} M_1(\mathbf{k}, \tau) &= \frac{\langle B^*(\mathbf{k}, 0) U_1(\tau) B(\mathbf{k}, 0) \rangle}{\langle |(\mathbf{k} \mathbf{p}_1) n_{\mathbf{k}}(0)|^2 \rangle}, \\ B(\mathbf{k}, 0) &= i \frac{(\mathbf{p}_1 \mathbf{k})^2}{m} n_{\mathbf{k}}(0) - \left[i K_B T k^2 + \sum_{j>1}^N (k \nabla_j) U(1, j) \right] n_{\mathbf{k}}(0), \\ U_1(\tau) &= \exp \left\{ \left[\hat{L}_F - \frac{1}{\langle |(\mathbf{k} \mathbf{p}_1) n_{\mathbf{k}}(0)|^2 \rangle} (\mathbf{p}_1 \mathbf{k}) n_{\mathbf{k}}(0) \right] \times \right. \\ &\times \left. \left\langle (\mathbf{p}_1 \mathbf{k}) n_{\mathbf{k}}^*(0) \hat{L}_F - \frac{1}{\langle |(\mathbf{k} \mathbf{p}_1) n_{\mathbf{k}}(0)|^2 \rangle} \hat{L}_F (\mathbf{p}_1 \mathbf{k}) n_{\mathbf{k}}(0) \right\rangle \times \right. \\ &\times \left. \left. \langle (\mathbf{p}_1 \mathbf{k}) n_{\mathbf{k}}^*(0) \rangle \right] \tau \right\}. \end{aligned}$$

Если ограничиться случаем малых s (приближением больших времен), то уравнение (16) можно записать в виде, аналогичном (10),

$$(17) \quad \begin{aligned} \frac{dM_{0\mathbf{k}}(t)}{dt} &= -\omega_{\mathbf{k}}^2 \int_0^t d\tau M_{1,0}(\mathbf{k}, \tau) M_0(\mathbf{k}, t-\tau), \\ M_{1,0}(\mathbf{k}, \tau) &= \langle B^*(\mathbf{k}, 0) \exp(\hat{L}_F \tau) B(\mathbf{k}, 0) \rangle / \langle |B(\mathbf{k}, 0)|^2 \rangle, \\ \omega_{\mathbf{k}}^2 &= \langle |B(\mathbf{k}, 0)|^2 \rangle V^2 / \langle (\mathbf{p}_1 \mathbf{k})^2 \rangle, \end{aligned}$$

где временная эволюция определяется обычным самосопряженным лиувиллианом жидкости $\hat{L}_F(1)$.

Введем теперь времена релаксации τ_m и τ_{m_1} функций памяти первого и второго порядков, соответственно. Предположим сначала, что эти времена одного порядка: $\tau_m \sim \tau_{m_1}$. При этом временная эволюция функций памяти первого и второго порядков происходит внутри одного временного масштаба, тогда можно положить $M_{1,0}(\mathbf{k}, \tau) \approx M_0(\mathbf{k}, \tau)$. Поэтому вместо (17) получаем нелинейное интегродифференциальное уравнение, определяющее кинетику $M_0(\mathbf{k}, t)$, следующего вида:

$$(18) \quad \frac{dM_0(\mathbf{k}, t)}{dt} = -\omega_m^2 \int_0^t d\tau M_0(\mathbf{k}, \tau) M_0(\mathbf{k}, t-\tau).$$

Решая (18) с помощью преобразования Лапласа, находим

$$(19) \quad \bar{M}_0(\mathbf{k}, s) = \frac{1}{2\omega_m^2} \{-s \pm \sqrt{s^2 + 4\omega_m^2}\}.$$

Учитывая, что в низкочастотном пределе при $s \rightarrow 0$

$$(20) \quad \tilde{n}(\mathbf{k}, s) = \{s + \omega_m^2 \bar{M}_0(\mathbf{k}, s)\}^{-1},$$

получаем

$$(21) \quad \tilde{n}(\mathbf{k}, s) = \left\{ s \left(1 - \frac{\omega_n^2}{2\omega_m^2} \right) \pm \frac{\omega_n^2}{2\omega_m^2} \sqrt{s^2 + 4\omega_m^2} \right\}^{-1}.$$

Отметим, что приближения, близкие к использованным нами для получения (14) и (21), применялись в работах [40, 41] для функций памяти более высокого порядка. Однако в [40, 41] они использовались для описания колебательной релаксации и переориентационного движения молекул жидкости и выбирались из чисто формальных математических соображений.

III. Для более детального описания немарковских свойств решения уравнения (17) при другом соотношении между временами релаксации τ_m и τ_{m_1} , запишем функцию памяти второго порядка в развернутом виде

$$(22) \quad M_{1,0}(\mathbf{k}, \tau) = C_R M_{1,0}^{(R)}(\mathbf{k}, \tau) + C_N M_{1,0}^{(N)}(\mathbf{k}, \tau),$$

$$M_{1,0}^{(R)}(\mathbf{k}, \tau) = \left\langle n_{\mathbf{k}}^*(0) \left[\frac{(\mathbf{p}_1 \mathbf{k})^2}{m} - K_B T k^2 \right] e^{L_P \tau} \left[\frac{(\mathbf{p}_1 \mathbf{k})^2}{m} - K_B T k^2 \right] n_{\mathbf{k}}(0) \right\rangle / \left\langle \left| \left[\frac{(\mathbf{p}_1 \mathbf{k})^2}{m} - K_B T k^2 \right] n_{\mathbf{k}}(0) \right|^2 \right\rangle,$$

$$M_{1,0}^{(N)}(\mathbf{k}, \tau) = \left\langle n_{\mathbf{k}}^*(0) \sum_{j>1}^N (\nabla_1 \mathbf{k}) u(1, j) \exp(\hat{L}_P \tau) n_{\mathbf{k}}(0) \times \right.$$

$$\left. \times \sum_{l>1}^N (\nabla_1 \mathbf{k}) u(1, l) \right\rangle / \left\langle \sum_{j>1}^N (\nabla_1 \mathbf{k}) u(1, j) \sum_{l>1}^N (\nabla_1 \mathbf{k}) u(1, l) \right\rangle,$$

$$C_R = \frac{\left\langle \left| \left[\frac{(\mathbf{p}_1 \mathbf{k})^2}{m} - K_B T k^2 \right] n_{\mathbf{k}}(0) \right|^2 \right\rangle}{\langle B^*(\mathbf{k}, 0) B(\mathbf{k}, 0) \rangle},$$

$$c_{\mathbf{k}} = \frac{\left\langle \sum_{j>1}^N (\mathbf{k}\nabla_j) u(1, j) n_{\mathbf{k}}^*(0) \sum_{l>1}^N [(\mathbf{k}\nabla_l) u(1, l)] n_{\mathbf{k}}(0) \right\rangle}{\langle B^*(\mathbf{k}, 0) B(\mathbf{k}, 0) \rangle}.$$

Функция памяти в (22) состоит из суммы ВКФ, связанных с флуктуацией потенциальной и кинетической энергии продольного движения частицы. Перекрестные вклады, содержащие кросс-корреляционные ВКФ, обращаются в нуль и выпадают вследствие усреднения по ориентациям.

Такая запись функции памяти второго порядка позволяет высказать несколько существенных предположений. Во-первых, при сравнительно высоких температурах основной вклад в $M_{1,0}(\mathbf{k}, \tau)$ будет давать кинетическая часть $M_{1,0}^{(k)}(\mathbf{k}, \tau)$, а при низких — потенциальная часть $M_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, \tau)$. Во-вторых, вследствие различной зависимости от волнового вектора \mathbf{k} на малых длинах волн будет преобладать кинетический вклад, а при больших — потенциальный. В-третьих, величина потенциального вклада в (22) существенным образом зависит от особенностей межчастичного потенциала взаимодействия, в частности от скорости его убывания с расстоянием. Например, для «мягких» потенциалов этот вклад будет мал, он будет возрастать в случае «жесткого» потенциала. Поэтому для «мягких» потенциалов, особенно в длинноволновом приближении, этим потенциальным вкладом можно пренебречь. Таким образом, эффективность потенциального вклада зависит от «жесткости» потенциала.

Введем теперь времена релаксации τ_{E_n} и τ_{E_k} флуктуаций потенциальной и кинетической энергии продольного движения избранной частицы и рассмотрим всевозможные случаи соотношения между временами τ_q , τ_{E_k} , τ_{E_n} .

1. $\tau_q \ll \tau_{E_k}, \tau_{E_n}$ — медленная релаксация флуктуаций кинетической и потенциальной энергии отдельного атома. В данном случае с достаточной степенью точности можно положить для нормированных ВКФ: $M_{1,0}(\mathbf{k}, \tau) \approx n(\mathbf{k}, \tau)$. Тогда уравнение (17) примет вид

$$(23) \quad \frac{dM_0(\mathbf{k}, t)}{dt} = -\omega_{\mathbf{m}}^2 \int_0^t d\tau n(\mathbf{k}, \tau) M_0(\mathbf{k}, t-\tau).$$

Решая (23) с помощью преобразования Лапласа, получаем

$$(24) \quad \tilde{M}_0(\mathbf{k}, s) = \{s + \omega_{\mathbf{m}}^2 \tilde{n}(\mathbf{k}, s)\}^{-1}.$$

Подставляя (24) в (20), окончательно находим

$$(25) \quad \tilde{n}(\mathbf{k}, s) = \frac{1}{2s\omega_{\mathbf{m}}^2} [-(s^2 + \omega_n^2 - \omega_{\mathbf{m}}^2) \pm \sqrt{(s^2 + \omega_n^2 - \omega_{\mathbf{m}}^2)^2 + 4s^2\omega_{\mathbf{m}}^2}].$$

2. $\tau_q \gg \tau_{E_k}, \tau_{E_n}$ — быстрая релаксация флуктуаций как кинетической, так и потенциальной энергии продольного движения отдельного атома. При таком соотношении между временами релаксации уравнение (17)

принимает вид

$$(26) \quad \frac{dM_0(\mathbf{k}, t)}{dt} = -\omega_m^2 \int_0^t d\tau [C_R E_R(\mathbf{k}, \tau) + C_N E_N(\mathbf{k}, \tau)] M_0(\mathbf{k}, t-\tau),$$

$$E_R(\mathbf{k}, \tau) = \left\langle \left[\frac{(\mathbf{k}p_1)^2}{m} - K_B T k^2 \right] n_{\mathbf{k}}^*(0) \exp(L_F \tau) \left[\frac{(\mathbf{k}p_1)^2}{m} - K_B T k^2 \right] n_{\mathbf{k}}(0) \right\rangle / \left\langle \left| \left[\frac{(\mathbf{k}p_1)^2}{m} - K_B T k^2 \right] n_{\mathbf{k}}(0) \right|^2 \right\rangle,$$

$$E_N(k, \tau) = \frac{\left\langle \sum_{j>1}^N (\nabla_j \mathbf{k}) u(1, j) \exp(\hat{L}_F \tau) \sum_{l>1}^N (\nabla_l \mathbf{k}) u(1, l) \right\rangle}{\left\langle \sum_{j>1}^N (\nabla_j \mathbf{k}) u(1, j) \sum_{l>1}^N (\nabla_l \mathbf{k}) u(1, l) \right\rangle}.$$

Дальнейшее детальное поведение решения уравнения (26) зависит от взаимного соотношения между временами релаксации τ_{E_R} и τ_{E_N} .

Рассмотрим 3 частных случая:

а) $\tau_{E_R} \ll \tau_{E_N}$. В данном случае временная зависимость ядра уравнения (26) определяется только релаксацией потенциального вклада, и (26) принимает вид

$$(27) \quad \frac{dM_0(\mathbf{k}, t)}{dt} = -\omega_m^2 C_N \int_0^t d\tau E_N(\mathbf{k}, \tau) M_0(\mathbf{k}, t-\tau).$$

Решая (27) с помощью преобразования Лапласа, получаем

$$(28) \quad \tilde{M}_0(\mathbf{k}, s) = \{s + \omega_m^2 C_N \tilde{E}_N(\mathbf{k}, s)\}^{-1}.$$

Далее, учитывая (20), находим

$$(29) \quad \tilde{n}(\mathbf{k}, s) = \{s + \omega_n^2 [s + \omega_m^2 C_N \tilde{E}_N(\mathbf{k}, s)]^{-1}\}^{-1};$$

б) $\tau_{E_R} \gg \tau_{E_N}$. При таком соотношении между временами релаксации уравнение (26) имеет вид

$$(30) \quad \frac{dM_0(\mathbf{k}, t)}{dt} = -\omega_m^2 C_R \int_0^t d\tau E_R(\mathbf{k}, \tau) M_0(\mathbf{k}, t-\tau).$$

Используя преобразование Лапласа и (20) аналогично случаю «а», получаем решение

$$(31) \quad \tilde{n}(\mathbf{k}, s) = \{s + \omega_n^2 [s + \omega_m^2 C_R \tilde{E}_R(\mathbf{k}, s)]^{-1}\}^{-1};$$

в) $\tau_{E_R} \sim \tau_{E_N}$. При таком режиме релаксации оба вклада в ядро уравнения (26) играют равнозначную роль, и совместное решение системы (10), (26) имеет вид

$$(32) \quad \tilde{n}(\mathbf{k}, s) = \{s + \omega_n^2 [s + \omega_m^2 (C_R \tilde{E}_R(\mathbf{k}, s) + C_N \tilde{E}_N(\mathbf{k}, s))]^{-1}\}^{-1};$$

3. $\tau_q \sim \tau_{M_{1,0}^{(n)}}$. Здесь релаксация ВКФ $n(\mathbf{k}, \tau)$ и $M_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, \tau)$ происходит на одном временном интервале, и, следовательно, с достаточной степенью точности можно положить $n(\mathbf{k}, \tau) \approx M_0(\mathbf{k}, \tau)$. Заметим далее, что функции $M(\mathbf{k}, \tau)$ и $M_0(\mathbf{k}, \tau)$ очень близки по своему виду, т. к. содержат близкие по виду корреляции функций импульса частицы. Предположим, что $M_{1,0}^{(k)}(\mathbf{k}, \tau) \approx M_0^{(k)}(\mathbf{k}, \tau)$. Тогда кинетическое уравнение (17) принимает следующий вид:

$$(33) \quad \frac{dM_0(\mathbf{k}, t)}{dt} = -\omega_m^2 \int_0^t d\tau [C_k M_0(\mathbf{k}, \tau) + C_n n(\mathbf{k}, \tau)] M_0(\mathbf{k}, t-\tau).$$

Решая (33) с помощью преобразования Лапласа, находим

$$(34) \quad C_k \omega_m^2 \bar{M}_0^2(\mathbf{k}, s) + [C_n \omega_m^2 \bar{n}(\mathbf{k}, s) + s] \bar{M}_0(\mathbf{k}, s) - 1 = 0,$$

$$\bar{M}_0(\mathbf{k}, s) = \frac{1}{2C_k \omega_m^2} \{ -(C_n \omega_m^2 \bar{n}(\mathbf{k}, s) + s) \pm \sqrt{(C_n \omega_m^2 \bar{n}(\mathbf{k}, s) + s)^2 + 4C_k \omega_m^2} \}.$$

Подставляя (34) в (20), получаем следующее кубическое уравнение:

$$(35) \quad \bar{n}^3(\mathbf{k}, s) + a\bar{n}^2(\mathbf{k}, s) + b\bar{n}(\mathbf{k}, s) + c = 0,$$

$$a = \left(\frac{\omega_n^4}{\omega_m^2} + \frac{s^2 \omega_n^2}{\omega_m^2} - C_k s^2 - C_n \omega_n^2 \right) / (s \omega_n^2 C_n),$$

$$b = \left(2C_k - \frac{\omega_n^2}{\omega_m^2} \right) / (\omega_n^2 C_n), \quad c = -C_k / (s \omega_n^2 C_n).$$

Корни уравнения (35) имеют вид

$$(36) \quad \bar{n}_1(\mathbf{k}, s) = A + B - a/3, \quad \bar{n}_{2,3}(\mathbf{k}, s) = -\frac{A+B}{2} \pm i \frac{A-B}{2} \sqrt{3} - a/3,$$

где

$$A = \sqrt[3]{-\frac{g}{2} + \sqrt{G}}, \quad B = \sqrt[3]{-\frac{g}{2} - \sqrt{G}}, \quad G = \left(\frac{h}{3}\right)^3 + \left(\frac{g}{2}\right)^2,$$

$$h = -\frac{a^2}{3} + b, \quad g = 2\left(\frac{a}{3}\right)^3 - \frac{ab}{3} + c$$

(в качестве A и B берутся любые значения кубических корней, удовлетворяющие соотношению $AB = -h/3$);

4. $\tau_q \sim \tau_{M_{1,0}^{(k)}}$. Это означает равенство времен релаксации исходной ВКФ и кинетического вклада в функцию памяти второго порядка. При таком режиме релаксации молекулярных переменных аналогично предыдущему пункту можно положить $M_{1,0}^{(k)}(\mathbf{k}, \tau) \approx n(\mathbf{k}, \tau)$. Тогда вместо (17) имеем

$$(37) \quad \frac{dM_0(\mathbf{k}, t)}{dt} = -\omega_m^2 \int_0^t d\tau [C_k n(\mathbf{k}, \tau) + C_n M_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, \tau)] M_0(\mathbf{k}, t-\tau).$$

Применяя к (37) преобразование Лапласа, находим

$$(38) \quad \bar{M}_0(\mathbf{k}, s) = \{s + C_k \omega_m^2 \bar{n}(\mathbf{k}, s) + C_n \omega_m^2 \bar{M}_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, s)\}^{-1}.$$

Подставляя (38) в (20), окончательно получаем

$$(39) \quad C_R \omega_m^2 s \tilde{n}^2(\mathbf{k}, s) + [s^2 + \omega_n^2 - C_R \omega_m^2 + C_H \omega_m^2 s \tilde{M}_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, s)] \tilde{n}(\mathbf{k}, s) - \\ - s - C_H \omega_m^2 \tilde{M}_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, s) = 0, \\ \tilde{n}(\mathbf{k}, s) = \frac{1}{2C_R \omega_m^2 s} \left\{ -[s^2 + \omega_n^2 - C_R \omega_m^2 + C_H \omega_m^2 s \tilde{M}_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, s)] \pm \right. \\ \left. \pm \sqrt{[s^2 + \omega_n^2 - C_R \omega_m^2 + C_H \omega_m^2 s \tilde{M}_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, s)]^2 + 4C_R \omega_m^2 s (s + C_H \omega_m^2 \tilde{M}_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, s))} \right\}.$$

IV. Используя полученные выражения (13), (14), (21), (25), (29), (31), (32), (36), (39) для $\tilde{n}(\mathbf{k}, s)$ и (4), теперь можно найти закон некогерентного рассеяния медленных нейтронов $S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega)$ для различных режимов молекулярной релаксации. Подставляя (13), (14), (21), (25), (29), (31), (32), (36), (39) в (4), для $S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega)$ получаем следующие выражения:

1. В импульсном приближении ($\tau_p \ll \tau_q$)

$$(40) \quad S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \frac{\omega_n^2 \tilde{n}(i\omega)}{\omega^2 + \omega_m^2 \tilde{n}(i\omega)}.$$

Заметим, что хотя этот результат не нов, а подобные выражения для $S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega)$ через ВКФ импульса были ранее хорошо известны [18, 27], его целесообразно здесь привести как пример применения идеи иерархии времен релаксации.

2. В простом корреляционном приближении ($\tau_p \gg \tau_q$)

$$(41) \quad S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi\omega_n^2} \sqrt{4\omega_n^2 - \omega^2}.$$

3. В корреляционном приближении для функции памяти второго порядка ($\tau_m \sim \tau_n$)

$$(42) \quad S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{(\omega_n^2/2\omega_m^2) \sqrt{4\omega_m^2 - \omega^2}}{\omega^2 (1 - \omega_n^2/2\omega_m^2)^2 + \omega_n^4 (4\omega_m^2 - \omega^2)/4\omega_m^4}.$$

4. При медленной релаксации потенциального и кинетического вкладов в функцию памяти второго порядка ($\tau_q \ll \tau_{E_R}, \tau_{E_H}$)

$$(43) \quad S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{2i\omega\omega_m^2} \sqrt{(\omega_n^2 - \omega_m^2 - \omega^2)^2 - 4\omega^2\omega_m^2} \right\}.$$

5. При быстрой релаксации потенциального и кинетического вклада в функцию памяти второго порядка ($\tau_q \gg \tau_{E_R}, \tau_{E_H}$) и условию:

а) $\tau_{E_R} \ll \tau_{E_H}$

$$(44) \quad S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \frac{i\omega + C_H \omega_m^2 E_H(\mathbf{k}, i\omega)}{\omega_n^2 + i\omega C_H \omega_m^2 E_H(\mathbf{k}, i\omega) - \omega^2}.$$

б) $\tau_{E_H} \gg \tau_{E_R}$

$$(45) \quad S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \frac{i\omega + \omega_m^2 C_R E_R(\mathbf{k}, i\omega)}{\omega_n^2 - \omega^2 + i\omega\omega_m^2 C_R E_R(\mathbf{k}, i\omega)}$$

$$в) \tau_{E_K} \sim \tau_{E_\Pi}$$

$$(46) \quad S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \frac{i\omega + \omega_m^2 [C_R E_K(\mathbf{k}, i\omega) + C_\Pi E_\Pi(\mathbf{k}, i\omega)]}{\omega_n^2 - \omega^2 + i\omega\omega_m^2 [C_R E_K(\mathbf{k}, i\omega) + C_\Pi E_\Pi(\mathbf{k}, i\omega)]}.$$

Отметим, что для практического использования решений (44)–(46) необходимо знать явный вид ВКФ флуктуаций потенциальной и кинетической энергии продольного движения отдельного атома. Их нахождение требует решения отдельной задачи, которое будет приведено в другом месте.

6. При равенстве времен релаксации ВКФ $n(\mathbf{k}, \tau)$ и $M_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, \tau)$ ($\tau_q \sim \tau_{M_{1,0}^{(n)}}$)

$$(47) \quad S_{\text{inc}}^{(4)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ A(\mathbf{k}, i\omega) + B(\mathbf{k}, i\omega) - \frac{a(\mathbf{k}, i\omega)}{3} \right\},$$

$$(48) \quad S_{\text{inc}}^{(2),(3)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ -\frac{A(\mathbf{k}, i\omega) + B(\mathbf{k}, i\omega)}{2} \pm i \frac{A(\mathbf{k}, i\omega) - B(\mathbf{k}, i\omega)}{2} \sqrt{3 - a(\mathbf{k}, i\omega)/3} \right\},$$

где частотные функции $A(\mathbf{k}, i\omega)$, $B(\mathbf{k}, i\omega)$ и $a(\mathbf{k}, i\omega)$ определены в (36).

7. При равенстве времен релаксации ВКФ $n(\mathbf{k}, \tau)$ и $M_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, \tau)$ ($\tau_q \sim \tau_{M_{1,0}^{(n)}}$)

$$(49) \quad S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ -\frac{C_\Pi}{2C_R} \tilde{M}_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, i\omega) \pm \frac{1}{2i\omega\omega_m^2 C_R} \times \right. \\ \left. \times \sqrt{[\omega_n^2 - C_R\omega_m^2 - \omega^2 + iC_\Pi\omega\omega_m^2 \tilde{M}_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, i\omega)]^2 +} \right. \\ \left. + 4i\omega\omega_m^2 C_R (i\omega + \omega_m^2 C_\Pi \tilde{M}_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, i\omega)) \right\}.$$

Выбор знака в (48), (49) определяется правильной асимптотикой $S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega)$ при малых и больших частотах: при $\omega \rightarrow 0$ должны выполняться конечность и положительность $S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega)$, при $\omega \rightarrow \infty$ должно выполняться условие $\lim_{\omega \rightarrow \infty} S_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = 0$. Решение (49) может быть использовано

для практических расчетов при известной спектральной плотности ВКФ $M_{1,0}^{(n)}(\mathbf{k}, \tau)$, нахождение которой также требует решения отдельной задачи.

Частотные релаксационные параметры ω_n^2 , ω_m^2 и безразмерные постоянные C_Π , C_R , входящие в (40)–(49), после выполнения статистического усреднения в равновесной жидкости принимают вид

$$(50) \quad \omega_n^2 = \frac{K_B T}{m} k^2, \quad \omega_m^2 = 2\omega_n^2 + \omega_E^2, \\ C_\Pi = \omega_E^2 / \omega_m^2, \quad C_R = 2\omega_n^2 / \omega_m^2, \\ \omega_E^2 = \frac{N}{mV} \int d\mathbf{r} g(r) \nabla^2 u(r),$$

где $K_B T$ — тепловая энергия, а $g(r)$ — радиальная функция распределения частиц жидкости.

Важным моментом в сокращенном описании релаксационных процессов в жидкостях является наличие широко развитой иерархии времен молекулярной релаксации различных физических величин (плотности, импульса, межмолекулярных сил, кинетической и потенциальной энергии отдельных частиц, потоков и др.). Возникает вопрос: каким физическим ситуациям соответствуют выбранные нами соотношения между временами релаксации τ_q , τ_p , τ_E и т. д.? Из физических соображений ясно, что выбор того или иного соотношения предопределяется как типом жидкости (сжиженные инертные газы, проводящие жидкости — металлы и полупроводники, молекулярные жидкости и др.), так и конкретной областью волновых векторов (малые или большие k), частот (низкие или высокие ω), температур, плотности и других физических параметров. Наличие большого числа различных релаксационных режимов в жидкости достоверно установлено по данным как спиновой релаксации (см., в частности, [42–45]), так и когерентного рассеяния медленных нейтронов в жидкостях (см., например, [46–48]). Отдельные времена релаксации можно вычислить по формулам кинетической теории (например, τ_p — время релаксации импульса отдельной молекулы), другие можно измерить экспериментально. Некоторые релаксационные параметры могут быть установлены методами молекулярной динамики, а часть из них можно определить путем сравнения теории с экспериментально наблюдаемыми спектрами.

V. Применим развитую теорию к изучению закона некогерентного рассеяния медленных нейтронов жидкой смесью ^{36}Ag и ^{40}Ag в такой концентрации, когда рассеяние нейтронов происходит преимущественно некогерентно. Для такой жидкости имеется эксперимент при $T=85,2^\circ\text{K}$ [9], а также исследования методом молекулярной динамики [14]. Численные расчеты проведем в корреляционном приближении для функции памяти второго порядка (42). Частотные параметры ω_n^2 и ω_m^2 для различных значений волнового вектора k вычислим по формуле (50), используя для частоты Эйнштейна ω_E численное значение, полученное в [33]: $\omega_E = 7,59 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$. Результаты вычисления $S_{\text{inc}}(k, \omega)$ представлены на рис. 1–3 (отметим, что всюду на рис. 1–3 размерности частот ω , ω_n , ω_m — 10^{13} c^{-1} , закона некогерентного рассеяния $S_{\text{inc}}(k, \omega)$ — 10^{-13} c , значения волнового вектора k на рис. 1–3 — соответственно 1,0; 2,0; 3,0 Å^{-1} . На рисунках сплошная линия — наша теория — приближение (42), точки — экспериментальные данные [9]). Из рисунков видно, что экспериментальные данные по жидкому аргону хорошо согласуются с теорией, учитывающей немарковские релаксационные эффекты для одного из рассмотренных в (40)–(49) режимов релаксации молекулярных переменных.

Однако результаты настоящей теории следует рассматривать в более широком плане. Первый и самый главный вывод состоит в том, что релаксационные процессы, в том числе и те, которые влияют на некогерентное рассеяние медленных нейтронов в жидкостях, являются существенно немарковскими. Это следует учитывать при построении микроскопических моделей релаксации в конденсированных средах. Второй вывод — немарковская релаксационная кинетика естественно допускает су-

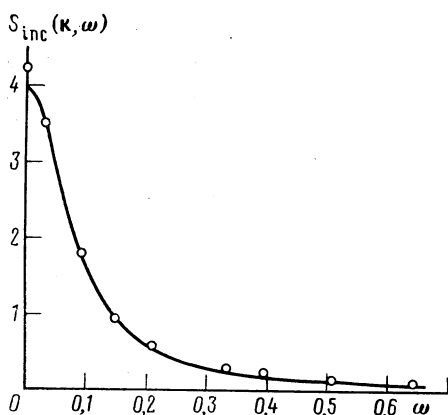


Рис. 1

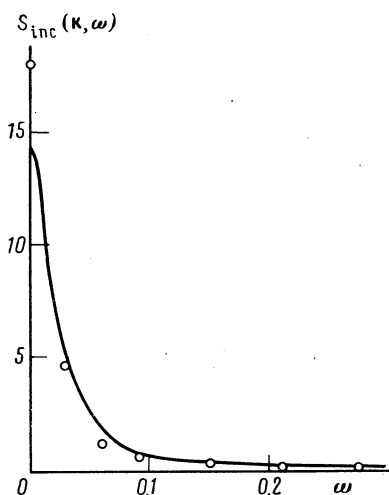


Рис. 2

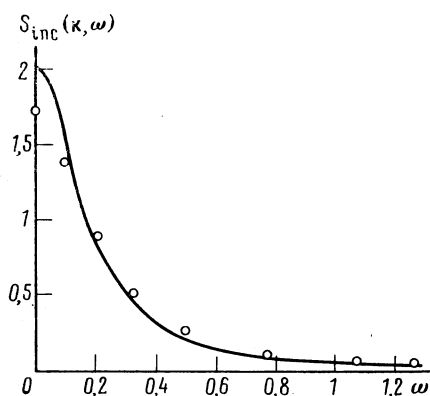


Рис. 3

существование большого числа различных релаксационных режимов, масштабы которых зависят от рассматриваемой области частот ω , волнового вектора \mathbf{k} , температур и других микроскопических параметров. В частности, заметную роль играет параметр, характеризующий «жесткость» парного потенциала межмолекулярного взаимодействия.

Список литературы

- [1] Крылов Н. С. Работы по обоснованию статистической физики. М.—Л.: Изд. АН СССР, 1948.
- [2] Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике М.—Л.: ОГИЗ, Гостехиздат, 1946.
- [3] Турчин В. Ф. Медленные нейтроны. М.: Госатомиздат, 1963.
- [4] Гуревич И. И., Тарасов Л. В. Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, ГИФМЛ, 1965.
- [5] Larsson K. E., Dahlborg U. // Physica. 1964. V. 30. № 8. P. 1561–1599.
- [6] Kroo N., Borgonovi G., Skold K., Larsson K. E. // Phys. Rev. Lett. 1964. V. 12. № 25. P. 721–722.
- [7] Chen S. H., Eder O. J., Egelstaff P. A., Haywood B. C. G., Webb F. J. // Phys. Lett. 1965. V. 19. № 4. P. 269–271.
- [8] Dasannacharya B. A., Rao K. R. // Phys. Rev. 1965. V. 137. № 2A. P. 417–427.
- [9] Skold K., Larsson K. E. // Phys. Rev. 1967. V. 161. № 1. P. 102–116.
- [10] Cocking S. J. // J. Phys. 1969. V. C2. № 11. P. 2047–2062.
- [11] Skold K., Rowe J. M., Cstrowski G., Randolph P. D. // Phys. Rev. 1972. V. A6. № 3. P. 1107–1130.

- [12] Wood W., Erpenbeck J. // Ann. Rev. Phys. Chem. 1976. V. 27. № 1. P. 319-348.
 [13] Anderson J., Uello J. J., Yip S. // Physica. 1986. V. BC136. № 2. P. 172-177.
 [14] Levesque D., Verlet L. // Phys. Rev. 1970. V. A2. № 6. P. 2514-2528.
 [15] Bellissent-Funel M. C., Karn R., Dianoux A. J., Fontana M. P., Maisano G., Migliardo P., Wanderlingh F. // Mol. Phys. 1984. V. 52. P. 16-32.
 [16] Fontana M. P., Migliardo P., Maisano G., Bellissent-Funel M. C., Dianoux A. J. // Physica. 1986. V. BC136. № 2. P. 178-183.
 [17] Vineyard G. H. // Phys. Rev. 1958. V. 110. № 5. P. 999-1010.
 [18] Rahman A., Singwi K. S., Sjolander A. // Phys. Rev. 1962. V. 126. № 3. P. 986-996.
 [19] Copley J. R. D., Lovesey S. W. // Rep. Prog. Phys. 1975. V. 38. № 4. P. 461-563.
 [20] Egelstaff P. A. // Adv. Phys. 1962. V. 11. № 43. P. 203-232.
 [21] Юльмерьев П. М. // Некоторые вопросы физики жидкости. Казань: КГПИ, 1965. С. 41-55.
 [22] Kugler A. A. // J. Stat. Phys. 1973. V. 8. № 2. P. 107-153.
 [23] Nelkin M., Ghatak A. // Phys. Rev. 1964. V. 135. № 1A. P. 4-9.
 [24] Desai R. C., Nelkin M. // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 16. № 19. P. 839-841.
 [25] Gotze W., Zippelius A. // Phys. Rev. 1976. V. A14. № 5. P. 1849-1852.
 [26] Heller E. J., Reimers J. R., Drolshagen G. // Phys. Rev. 1987. V. A36. № 6. P. 2613-2627.
 [27] Sears V. F. // Canad. J. Phys. 1969. V. 47. № 2. P. 199-208.
 [28] Sears V. F. // Canad. J. Phys. 1970. V. 48. № 5. P. 616-629.
 [29] Lovesey S. W. // J. Phys. 1973. V. C6. № 11. P. 1856-1862.
 [30] Yoshida F., Takeno S. // Prog. Theor. Phys. 1975. V. 53. № 2. P. 293-304.
 [31] Yoshida F. // Prog. Theor. Phys. 1975. V. 54. № 4. P. 1009-1020.
 [32] Yoshida F. // Prog. Theor. Phys. 1976. V. 56. № 5. P. 1374-1382.
 [33] Yoshida F., Takeno S. // Prog. Theor. Phys. 1977. V. 58. № 1. P. 15-27.
 [34] Mori H. // Prog. Theor. Phys. 1965. V. 33. № 3. P. 423-425.
 [35] Mori H. // Prog. Theor. Phys. 1965. V. 34. № 3. P. 765-776.
 [36] Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1974.
 [37] Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.). Введение в квантовую статистическую механику. М.: Наука, ГРФМЛ, 1984.
 [38] Van Hove L. // Phys. Rev. 1954. V. 95. № 1. P. 249-262.
 [39] Юльмерьев П. М. // ТМФ. 1977. Т. 30. № 2. С. 264-281.
 [40] Gburski Z. // Chem. Phys. Lett. 1985. V. 115. № 2. P. 236-240.
 [41] Pasterny K., Kocot A. // Chem. Phys. Lett. 1987. V. 139. № 3. P. 295-299.
 [42] Юльмерьев П. М. // Acta Phys. Pol. 1984. V. A65. № 1. P. 25-32, 33-38.
 [43] Юльмерьев П. М. // УФЖ. 1980. Т. 25. № 11. С. 1872-1879.
 [44] Вишневецкая Г. П., Гумеров Ф. М., Козырев Б. М. // ТЭХ. 1975. Т. 11. № 2. С. 199-204.
 [45] Gumerov F. M., Kozyrev B. M., Vischnevskaya G. P. // Mol. Phys. 1975. V. 29. № 3. P. 935-951.
 [46] Egelstaff P. A. // Z. Phys. Chem. 1988. V. 156. № 1. P. 311-329.
 [47] Morkel C., Gronemeyer C., Glaser W. // Z. Phys. Chem. 1988. V. 156. № 1. P. 357-363.
 [48] Ladd Anthony J. C., Alley Edward W., Alder Bernt J. // Z. Phys. Chem. 1988. V. 156. № 1. P. 330-337.

Казанский государственный
педагогический институт

Поступила в редакцию
7.II.1989 г.

V. Yu. Shurygin, R. M. Yulmetiev

INFLUENCE OF NONMARKOVIAN EFFECTS IN THERMAL MOVEMENT OF PARTICLES ON INTENSITY OF INCOHERENT SCATTERING OF SLOW NEUTRONS IN LIQUIDS

To make clear the role of nonmarkovian effects in the process of incoherent scattering of slow neutrons, kinetics of local density fluctuations for a single liquid atom is investigated on the basis of the Bogoliubov idea of the reduced description of many-body systems. Exact kinetic equations for the time correlation function of density fluctuations and the memory function are constructed by means of the Mori projection operator method. The equations derived are solved in the long-time approximation using the other fundamental idea by Bogoliubov about the hierarchy of relaxation times. Several methods of calculating the incoherent scattering law $S_{inc}(k, \omega)$ for various molecular relaxation regimes are suggested on the basis of these solutions. It is shown that the relaxation processes responsible for the incoherent scattering are essentially nonmarkovian. Numerical calculations are carried out for $S_{inc}(k, \omega)$ of liquid argon at $T=85,2^\circ$ K for wave numbers varying from 1 \AA^{-1} to 3 \AA^{-1} . Good agreement with the experiment is obtained in the approximation which takes into account the second order memory function.