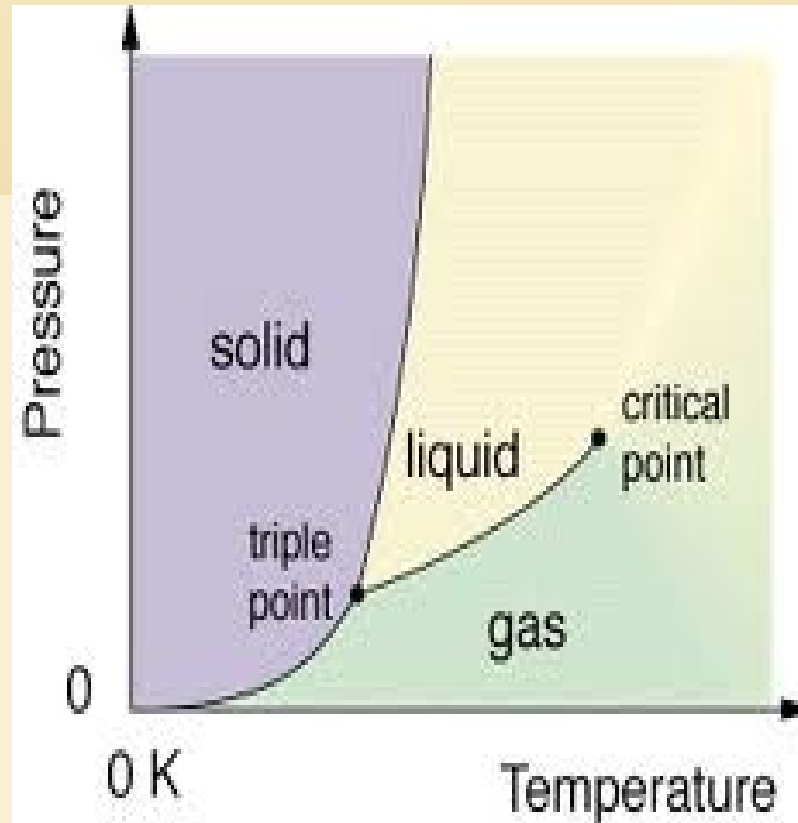
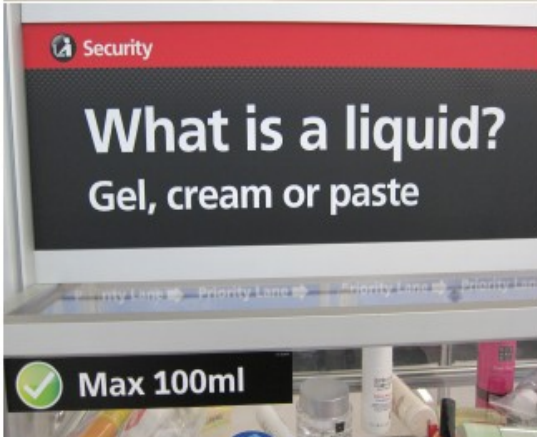


Два лика жидкости: между твердым телом и газом.

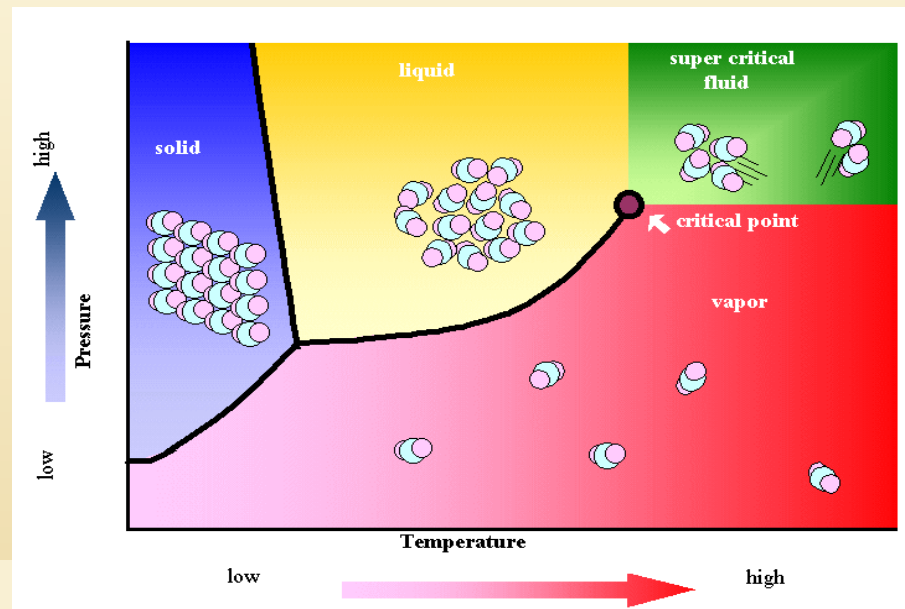
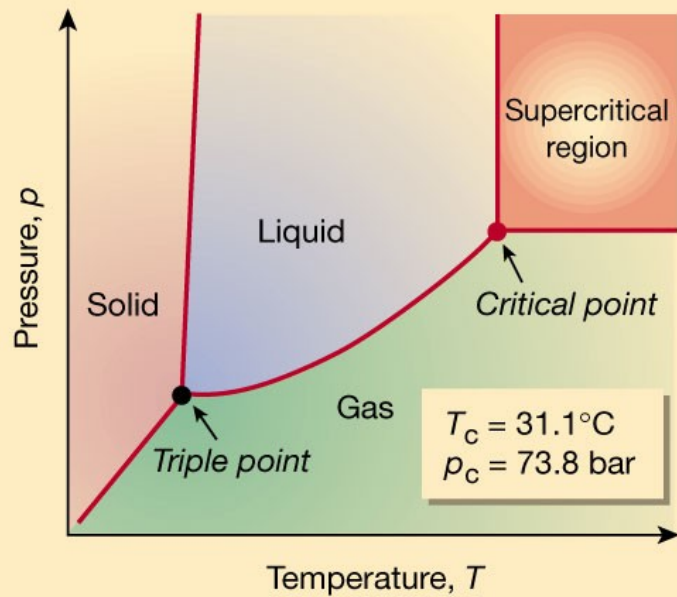


План

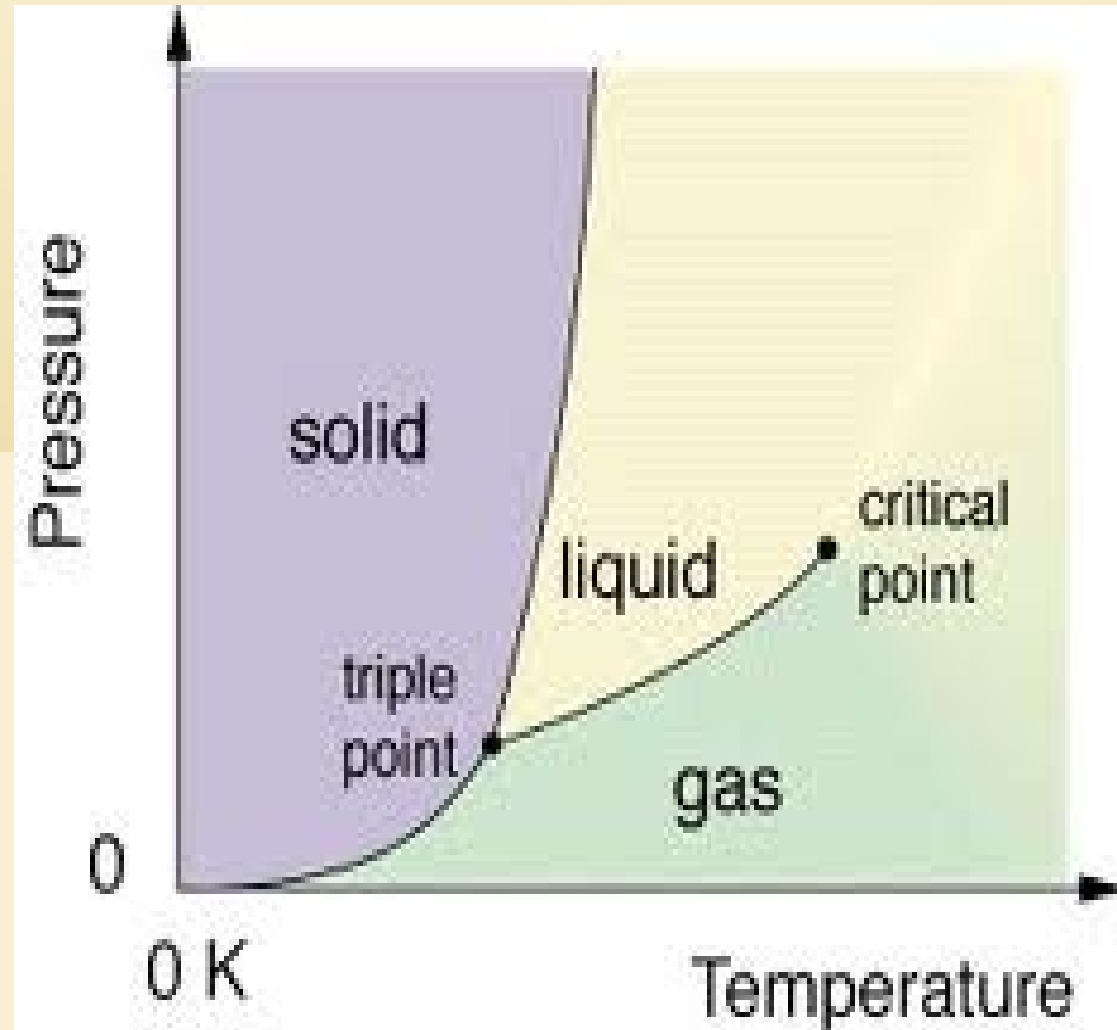
- Проблема описания жидкого состояния – связь с системами с сильной корреляцией
- Жидкость как плотный газ. Структура
- Жидкость как плотный газ. Динамика
- «Твердоподобная» жидкость – структура ближнего порядка и фазовые превращения
- «Твердоподобная» жидкость – коллективные продольные и поперечные возбуждения – эксперимент
- «Твердоподобная» жидкость – коллективные продольные и поперечные возбуждения – теория
- От стекла к газу – теплоемкость флюидов
- Кроссовер от «твердоподобной» жидкости к плотному газу в закритической области
- Проблема «сшивки» «газового» и «твердотельного» описаний

Разрыв шаблонов

- Система небольшого числа связанных нелинейных осцилляторов демонстрируют динамику всех агрегатных состояний вещества
- «Школьный» критерий различия между жидкостью и газом - неверный
- В жидкостях могут иметь место фазовые переходы 1го рода с изменением структуры
- Во всех жидкостях имеются поперечные возбуждения
- Ротонный минимум имеется во всех жидкостях, а не только в гелии
- Модель плотности кристаллических фононных состояний Дебая хорошо работает для жидкостей и даже для плотных газов
- Собственные возбуждения в жидкостях не затухают
- В сверхкритической области различие между жидкостью и газом сохраняется , и имеется соответствующая линия динамического кроссовера



**жидкости- отсутствие
малого параметра.
Кинетическая энергия
частиц сравнима с
потенциальной.
Проблема полностью
эквивалентна
трудностям в системах
с сильной
корреляцией и в
теории сильных
взаимодействий в
теории поля. С газовой
стороны - включение
сильного
взаимодействия, с
твердой стороны-
бифуркации решений
при нелинейных**



$$H_f = \frac{1}{2} \sum_i \left(\dot{\phi}_i^2 + \omega_i^2 \phi_i^2 + V(\phi_i) \right)$$

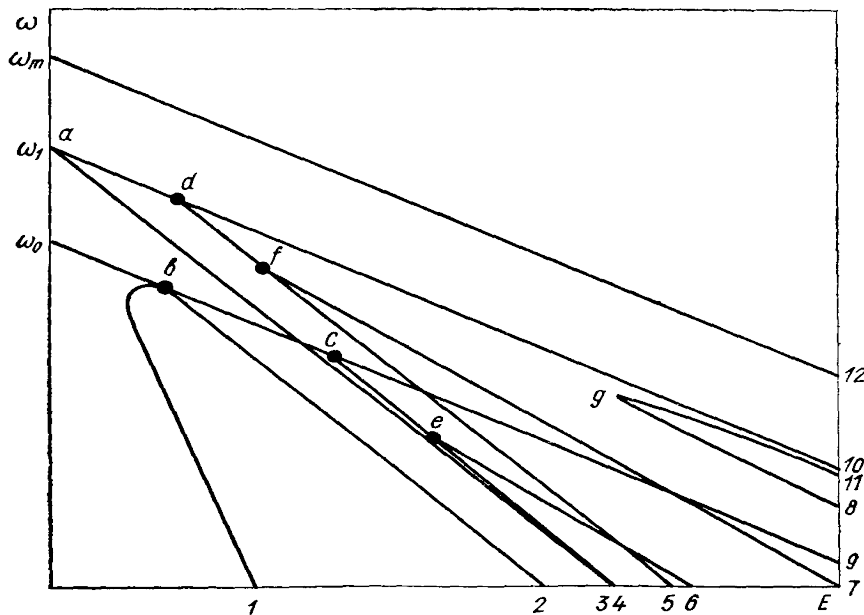
$$V(\phi) = g\phi^4$$

$$V(\phi) = -h\phi^3 + g\phi^4$$

$$V(\phi) = -g\phi^4 + \lambda\phi^6$$

$$H(Q) = \frac{1}{2} \sum_i \left(\dot{Q}_i^2 + \omega_i^2 Q_i^2 + H_{\text{int}}(Q_i) \right)$$

$$H_{\text{int}}(Q) = -\frac{g}{2}Q^4 + \frac{\lambda}{6}Q^6$$



Проблема физиков
(помимо того, что
существуют Ливанов,
Голодец, Ковальчук,
ФАНО и пр) **В ТОМ, ЧТО**
они не умеют
решать системы
нелинейных

$$E = \sum_{i=1}^4 \left(\frac{1}{2} \dot{x}_i^2 + \frac{\omega_0^2}{2} x_i^2 - \frac{\beta}{4} x_i^4 \right) + \frac{g^2}{2} \sum_{i=1}^4 (x_i - x_{i-1})^2$$

нелинейными

Жидкость- квазигаз

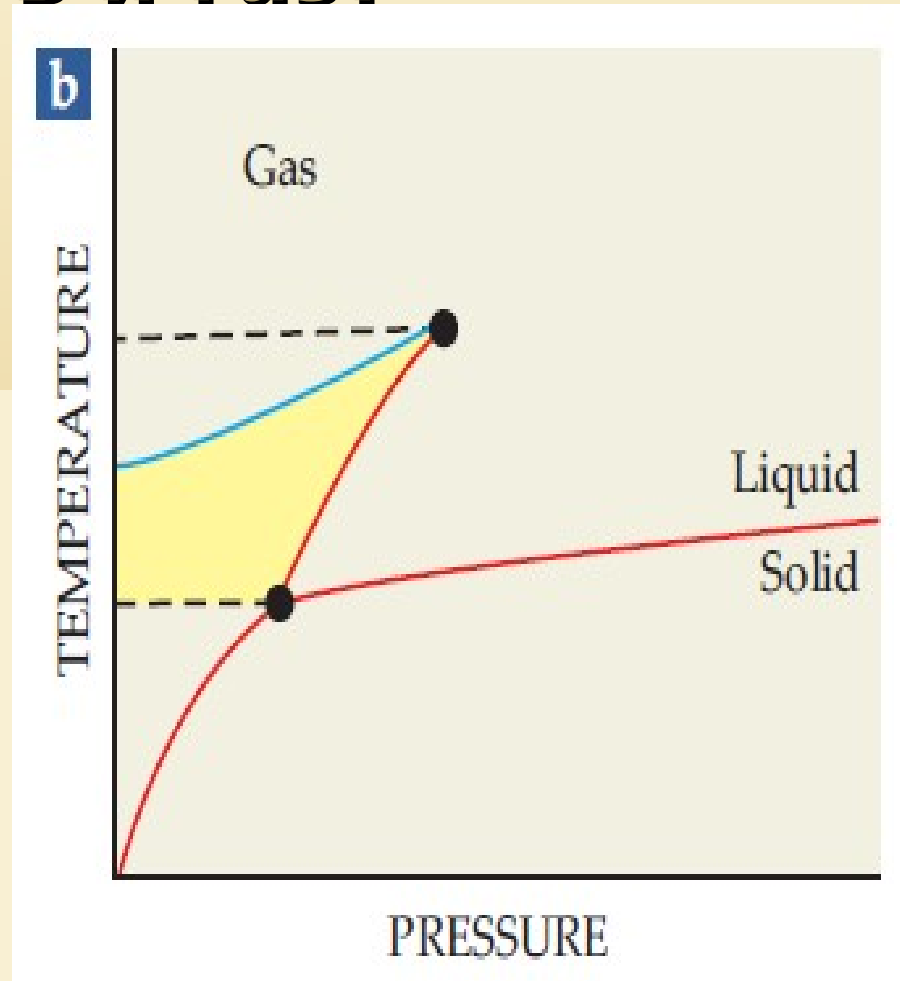
- 1) Текучесть
- 2) Нулевой модуль сдвига
- 3) Малая вязкость
- 4) Непрерывный переход в закритической области
- 5) Отсутствие дальнего порядка в структуре
- 6) Простое «единое» уравнение состояния

Жидкость- твердоподобная

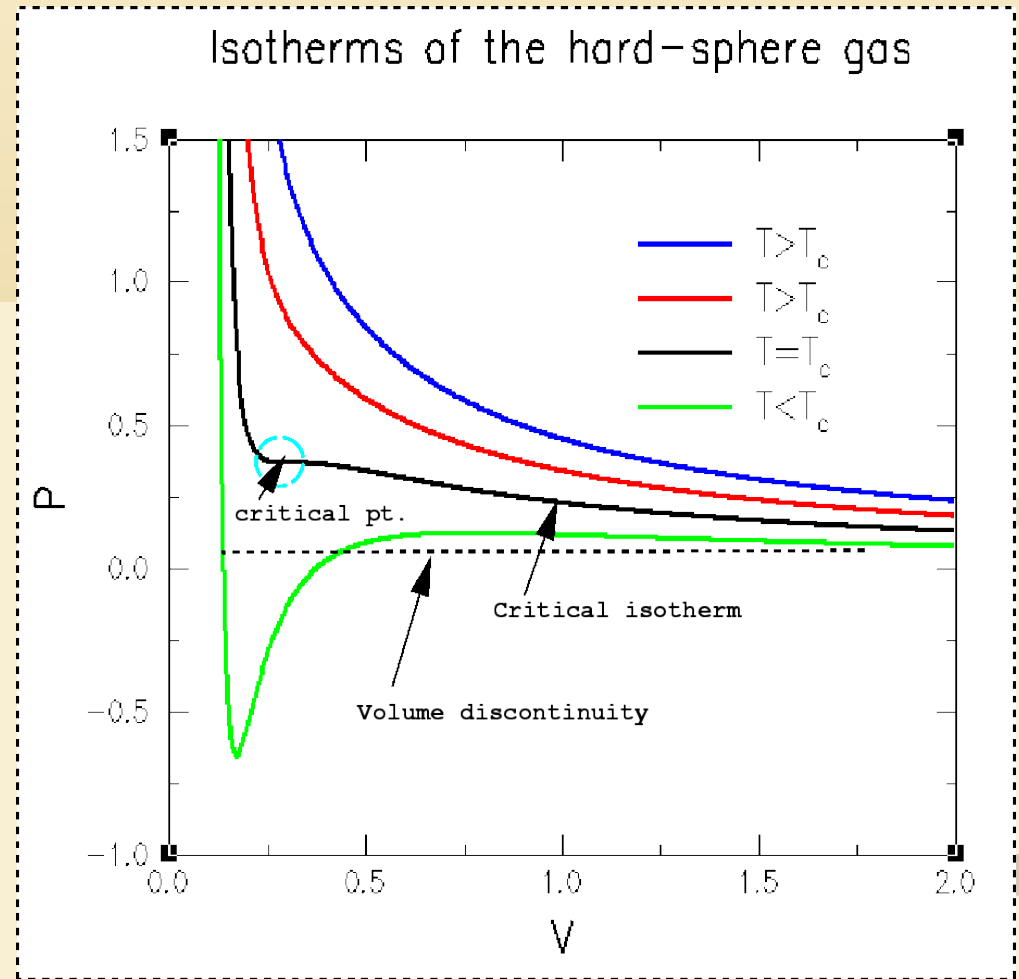
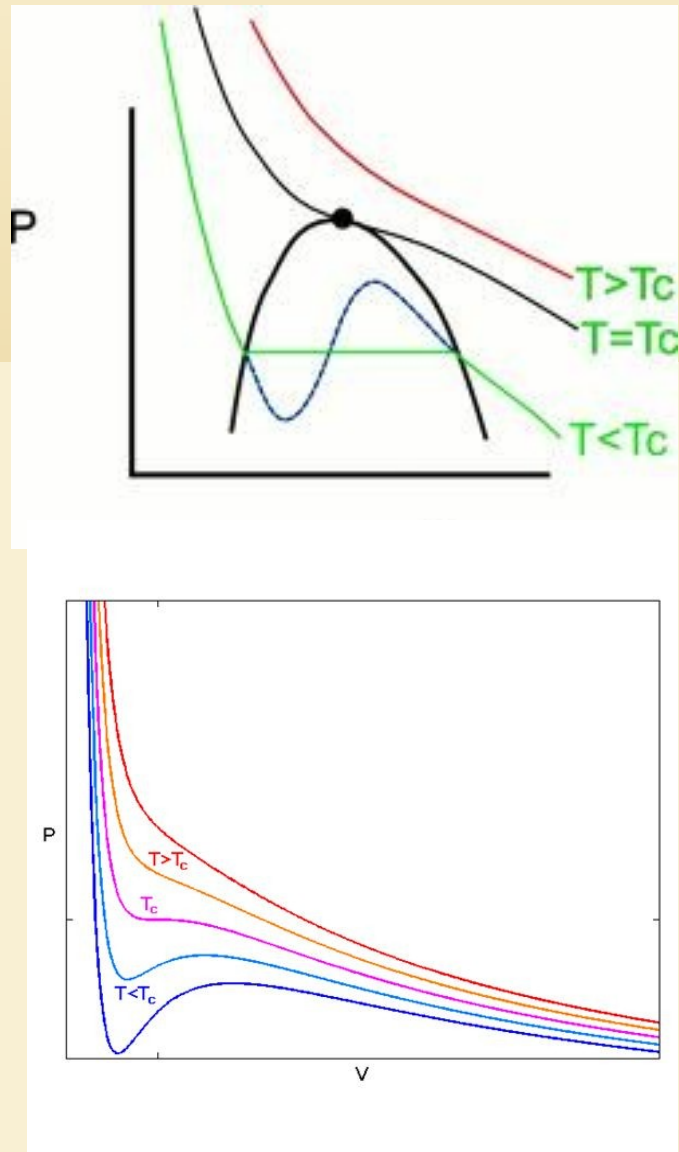
- 1) Плотность
- 2) Ненулевой модуль сдвига на высоких частотах
- 3) Малые скачки большинства свойств при плавлении
- 4) Непрерывный переход в твердое стекло
- 5) Существование ближнего и промежуточного порядка в структуре
- 6) «Твердотельная» теплоемкость

Жидкость- квазигаз Как различить жидкость и газ?

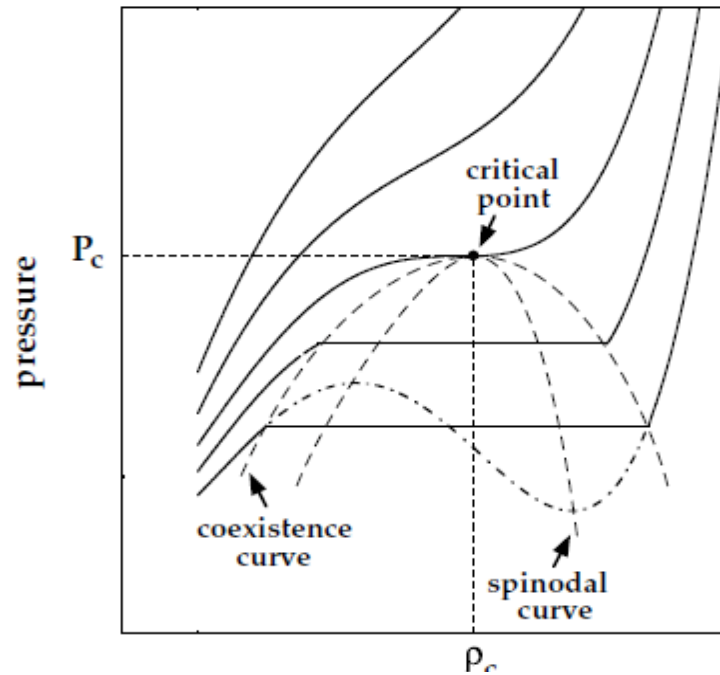
- Количественные характеристики- плотность, сжимаемость, вязкость...
- «Школьное» определение- занимает весь доступный объем или фиксированный объем
- Качественное различие- **жидкость- связанное состояние!**- следствия: конечный объем при нулевом давлении, выдерживает отрицательные давления, наличие поверхности и поверхностного натяжения и т.д.



Жидкость- квазигаз Жидкость - это связанное состояние?



Жидкость- квазигаз Критическая точка



$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{T=T_c} = 0, \quad \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_{T=T_c} = 0$$

MEAN-FIELD THEORY OF LIQUID-VAPOUR COEXISTENCE

137

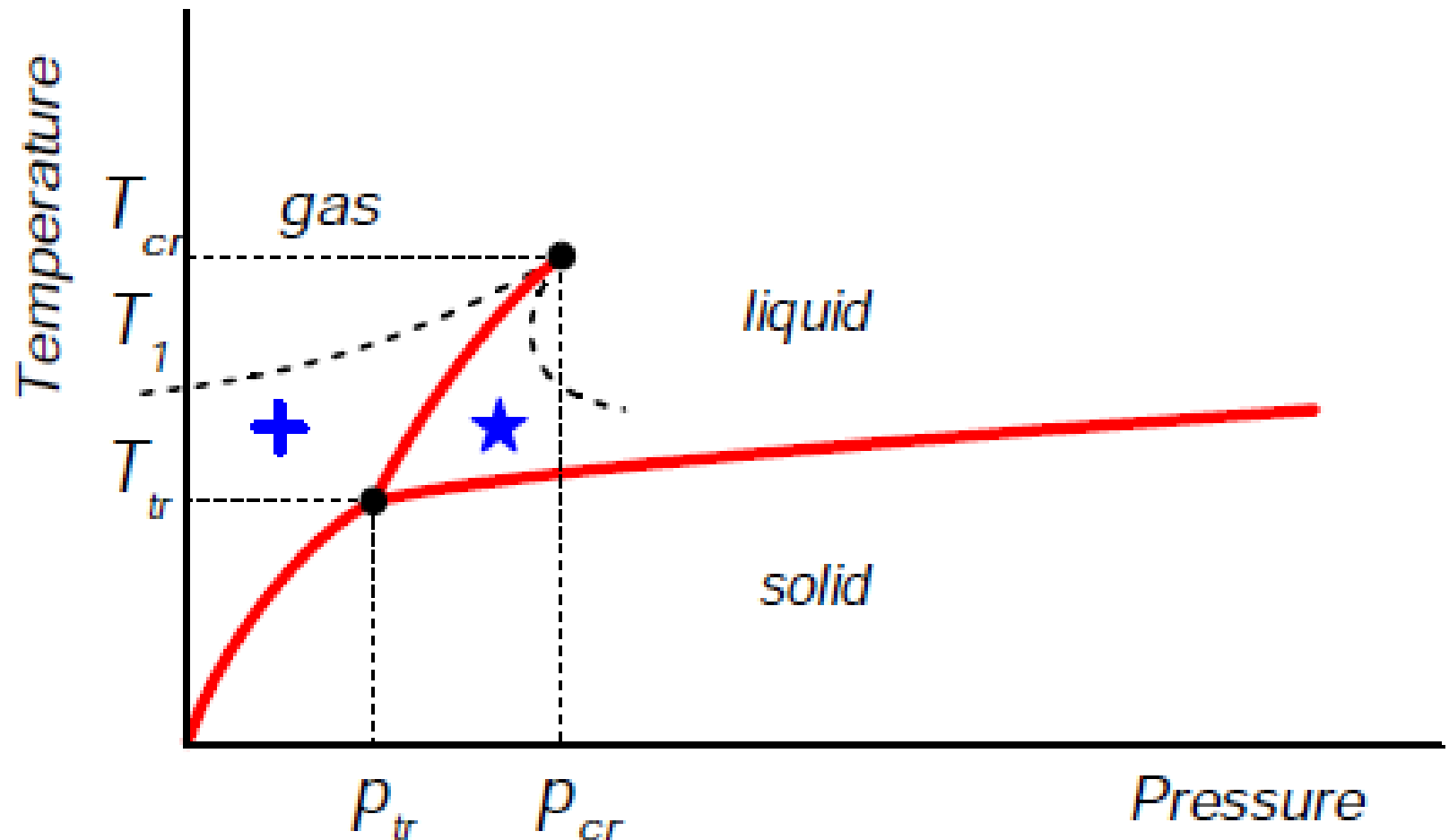
TABLE 5.1. *Definitions of the critical scaling laws and numerical values of the exponents*

	Definition	$T - T_c$	$\rho - \rho_c$	Expt ³²	Classical
α	$C_V = A(T - T_c)^{-\alpha}$	>0	0	0.10 ± 0.05	0^*
α'	$C_V = A' T - T_c ^{-\alpha'}$	<0	$\neq 0$		0^*
β	$\rho_L - \rho_G = B T - T_c ^\beta$	<0	$\neq 0$	0.32 ± 0.01	$\frac{1}{2}$
γ	$\chi_T = C(T - T_c)^{-\gamma}$	>0	0	1.24 ± 0.1	1
γ'	$\chi_T = C T - T_c ^{-\gamma'}$	<0	$\neq 0$		1
δ	$ P - P_c = D \rho - \rho_c ^\delta$	0	$\neq 0$	4.8 ± 0.2	3
ν	$\xi = \xi_0(T - T_c)^{-\nu}$	>0	0	0.63 ± 0.04	$\frac{1}{2}$
ν'	$\xi = \xi'_0 T - T_c ^{-\nu'}$	<0	$\neq 0$		$\frac{1}{2}$

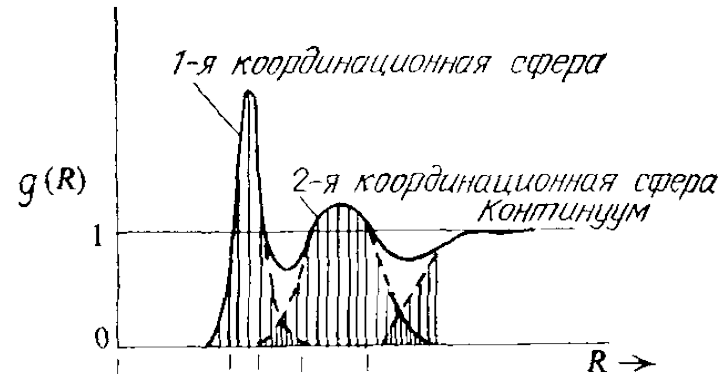
*Finite discontinuity.

Жидкость- квазигаз Жидкость

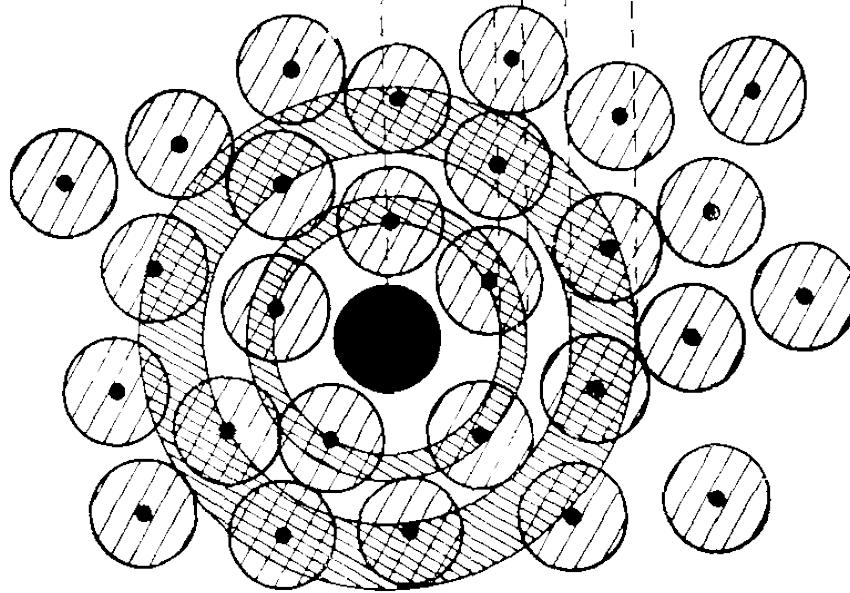
- ЭТО СВЯЗАННОЕ СОСТОЯНИЕ?



Жидкость- квазигаз Структура



$$g(1, 2) \equiv g(R_{12}).$$



Жидкость- квазигаз Структура

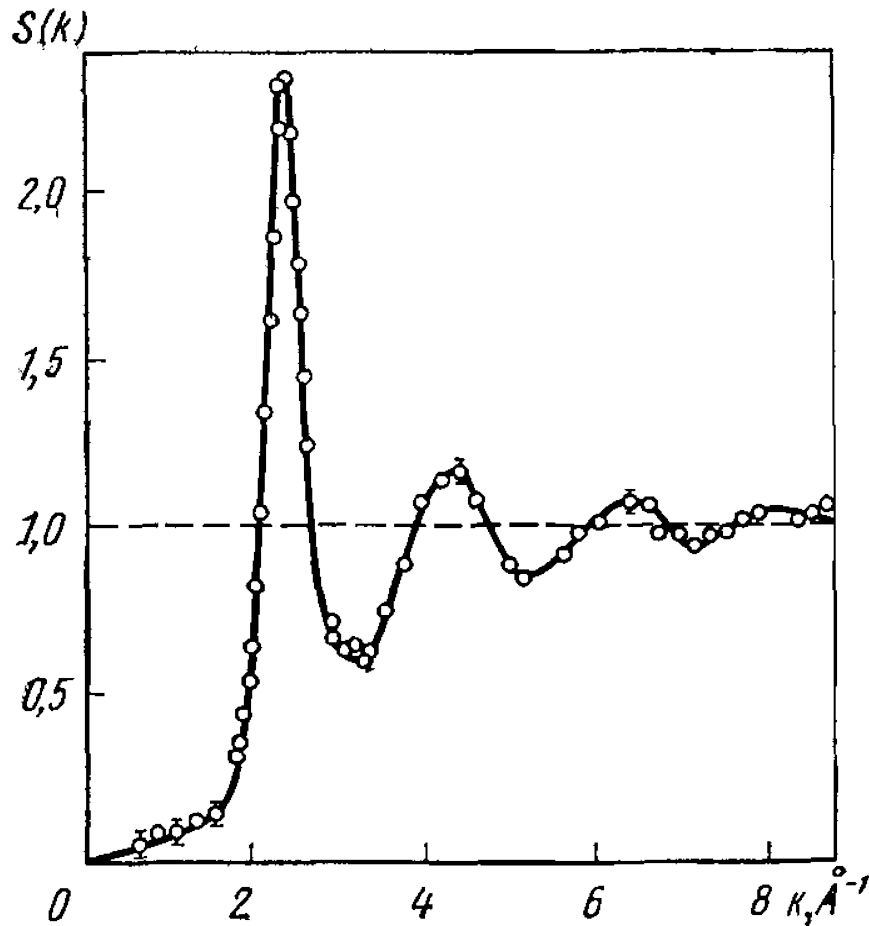


Рис. 1. Статический структурный фактор $S(k)$ жидкого таллия при 600 К, определенный методом рассеяния нейтронов [5]

$$S(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{q}, \omega) d\omega.$$

$$S(0) = nkT\chi_T.$$

Соотношени
е
Орнштейна-
Цернике

Жидкость- квазигаз Структура

$$S(k) = 1 + \rho \int_0^{\infty} 4\pi r^2 [g(r) - 1] (\sin kr / kr) dr.$$

$$E = \frac{3}{2} N k_B T + (N \rho / 2) \int_0^{\infty} \varphi(r) g(r) 4\pi r^2 dr.$$

$$p = \rho k_B T - \frac{\rho^2}{6} \int r \frac{\partial \varphi}{\partial r} g(r) dr.$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} S(k) \equiv 1 + \rho \int dV [g(r_{12}) - 1] = \frac{\langle N^2 \rangle - (\langle N \rangle)^2}{\langle N \rangle},$$

$$h(r) = g(r) - 1.$$

Полные корреляционные функции

$$t(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = g^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) - g(r_{12}) - g(r_{23}) - g(r_{31}) + 2.$$

Жидкость- квазигаз Структура через потенциал взаимодействия

$$k_B T \left(\frac{\partial g(r)}{\partial \rho} \right)_T = \int d\vec{r}_3 [g^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) - g(r) g(r_{23}) - g(r) g(r_{31}) + g(r)].$$

$$g^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = g(r_{12}) g(r_{23}) g(r_{31}).$$

Суперпозиционное приближение

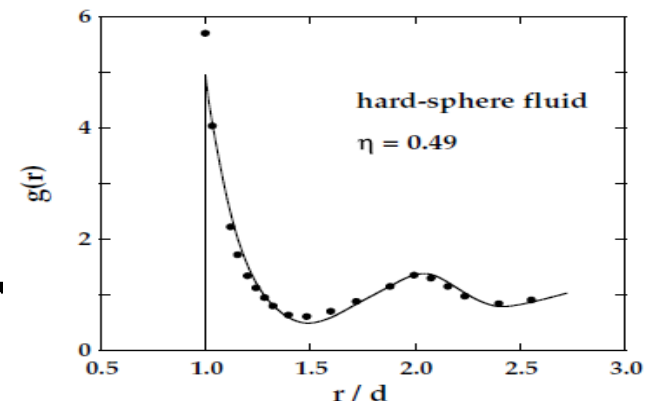
$$h(r) = c(r) + \rho \int c(|\vec{r} - \vec{r}'|) h(\vec{r}') d\vec{r}' \quad \tilde{c}(k) = \frac{\tilde{h}(k)}{1 + \tilde{h}(k)} \doteq \frac{S(k) - 1}{S(k)}$$

$c(r) \sim -\varphi(r)/k_B T$ Прямая корреляционная функция

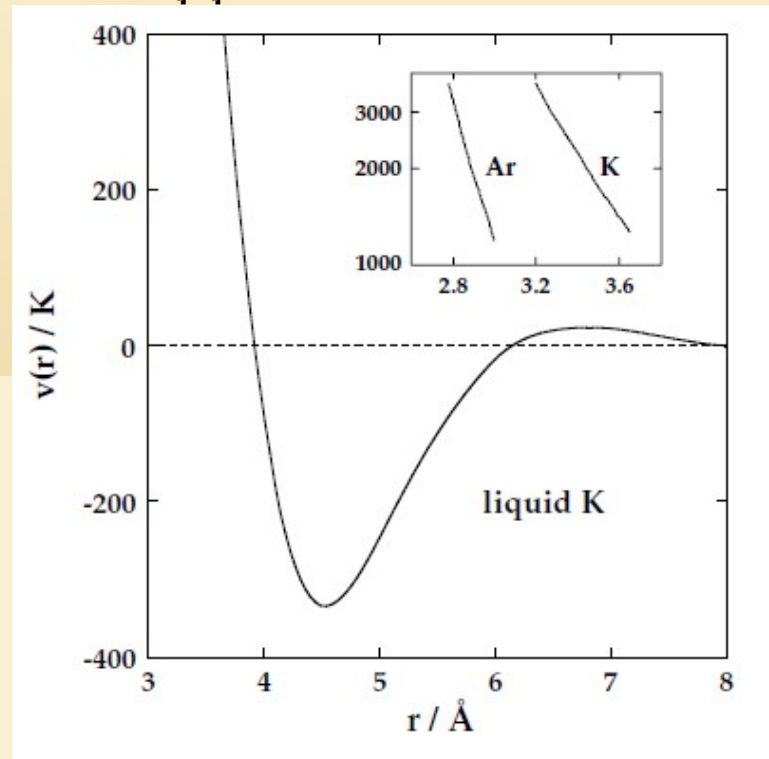
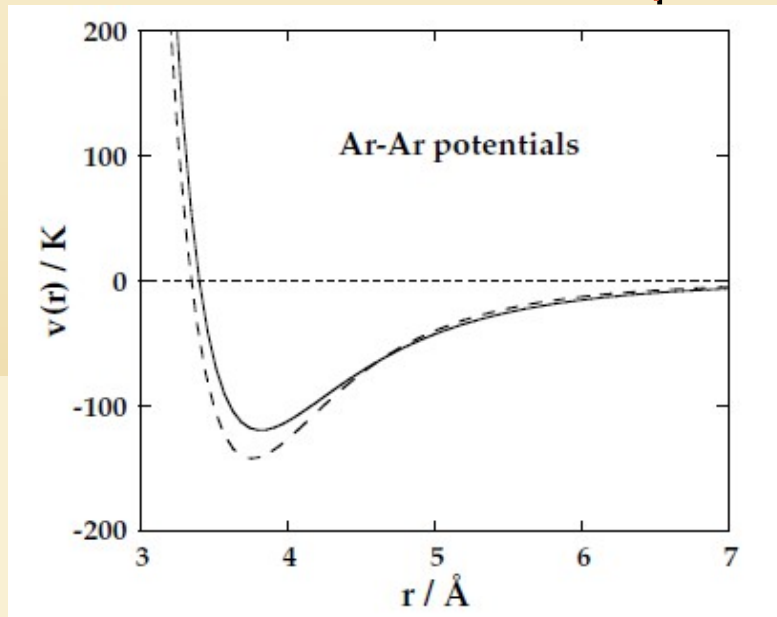
$$c(r) = g(r) \{ 1 - \exp [\varphi(r)/k_B T] \}.$$

Приближение Перкуса-Йевики

$$c(R) = -\frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4} + \frac{6\eta \left(1 + \frac{1}{2}\eta\right)^2}{(1-\eta)^4} \frac{R}{d} - \frac{\eta(1+2\eta)^2}{2(1-\eta)^4} \left(\frac{R}{d}\right)^3.$$



Жидкость- квазигаз Структура через потенциал взаимодействия



$$g(1, 2) \equiv e^{-\beta\psi(1, 2)}.$$

$$-\frac{1}{\beta g(1, 2)} \nabla_1 g(1, 2) \equiv \nabla_1 \psi(1, 2) =$$

$$= \nabla_1 \phi(1, 2) + \frac{n}{g(1, 2)} \int g(1, 2, 3) \nabla_1 \phi(1, 3) d3.$$

ББКИ

Жидкость- квазигаз Динамика

$$G(r, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{l, j=1}^N \delta [r + \vec{R}_l(0) - \vec{R}_j(t)] \right\rangle.$$

Временная корреляция

$$G(r, \infty) \approx \rho.$$

$$F(k, t) = \int d\vec{r} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) G(r, t)$$

Промежуточная функция

$$S(k, \omega) = \int dt \exp(-i\omega t) F(k, t) = \\ = \iint d\vec{r} dt \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] G(r, t)$$

Динамический
структурный
фактор

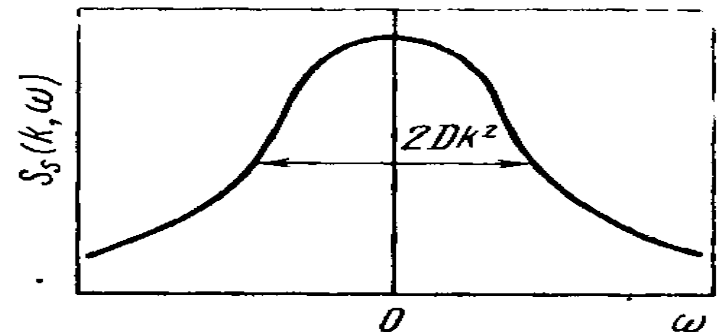


Рис. 14. Схема, поясняющая связь $S_s(k, \omega)$ с диффузией

Жидкость- квазигаз Динамика

Модель «связанных»

Теория взаимодействующих мод базируются на обобщенном интегрально-дифференциальном уравнении Ланжевена, общепринятому для описании релаксационных процессов в неупорядоченных средах

$$\frac{d\mathcal{R}(t)}{dt} = - \int_0^{\infty} \gamma(t') \mathcal{R}(t - t') dt' + \mathcal{F}(t)$$

$$\begin{cases} \gamma[\omega] \sim c_1 \mathcal{R}[\omega] + c_2 \mathcal{R}^2[\omega] \\ \gamma[\omega] \sim \mathcal{F}^2[\omega] \end{cases}$$

$$\mathcal{R}(t) \approx At^a + Bt^{-b}; 0 < a < 1; 0 < b < 1$$

$$\frac{d^2 \phi(k, t)}{dt^2} + \Omega_1^2(k) \phi(k, t) + \Omega_2^2(k) \int_0^t d\tau M_2(k, t - \tau) \frac{d\phi(k, \tau)}{d\tau} = 0,$$

$$\Omega_1^2(k) = \omega^{(2)}(k) = \frac{k_B T}{m} \frac{k^2}{S(k)},$$

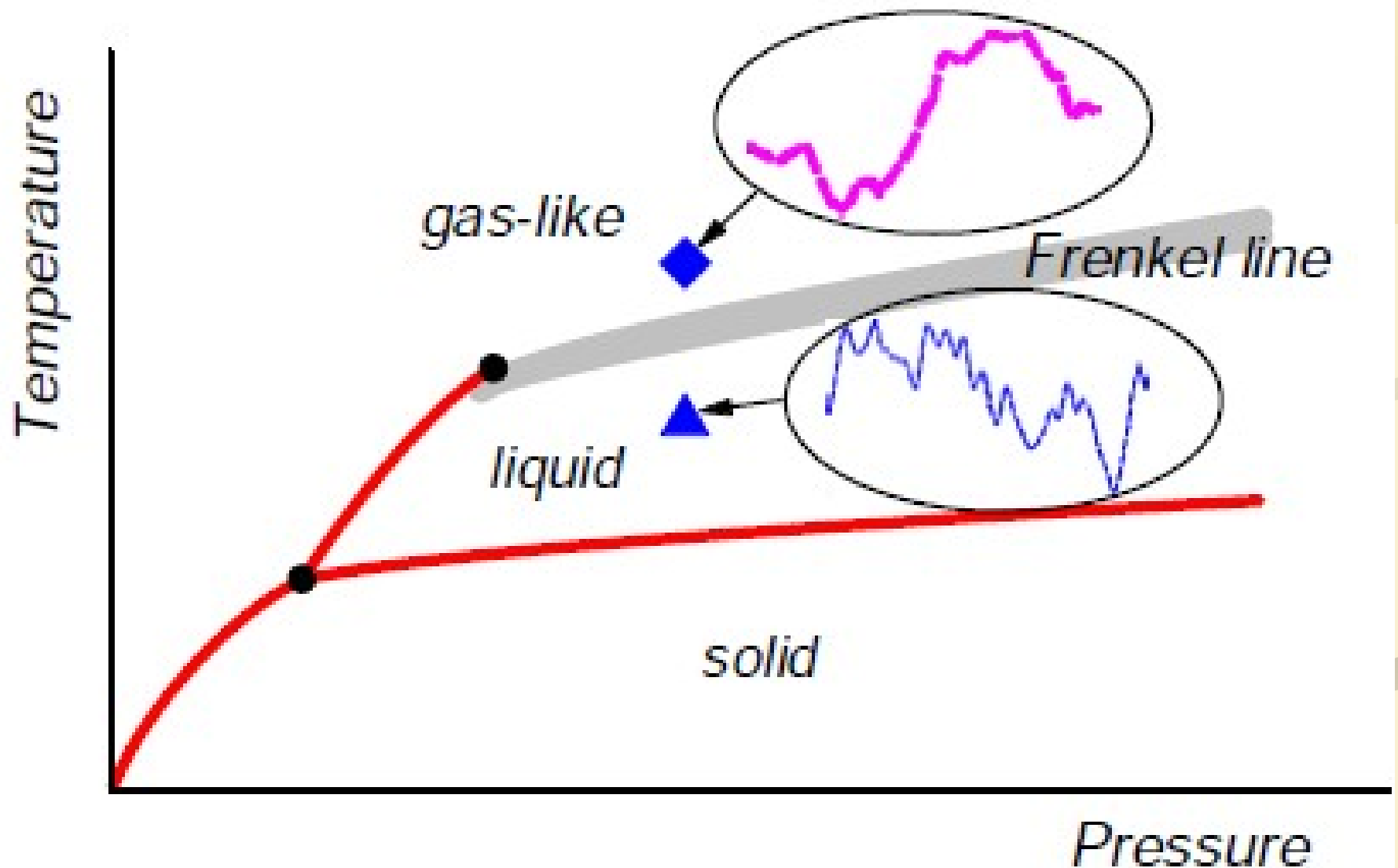
$$\Omega_2^2(k) = \frac{\omega^{(4)}(k)}{\omega^{(2)}(k)} - \omega^{(2)}(k) = 3 \frac{k_B T}{m} k^2 + \frac{N}{mV} \int d\mathbf{r} g(r) [1 - \cos(\mathbf{k}\mathbf{r})] \nabla_i^2 U(r) - \Omega_1^2(k).$$

$$S(k, \omega) = S(k) \left[f(k) \delta(\omega) + \frac{1 - f(k)}{\pi} \frac{[\Omega_1^2(k) + \Omega_2^2(k)] M_2'(k, \omega)}{[\omega^2 - \Omega_1^2(k) + \omega \Omega_2^2(k) M_2''(k, \omega)]^2 + [\omega \Omega_2^2(k) M_2'(k, \omega)]^2} \right],$$

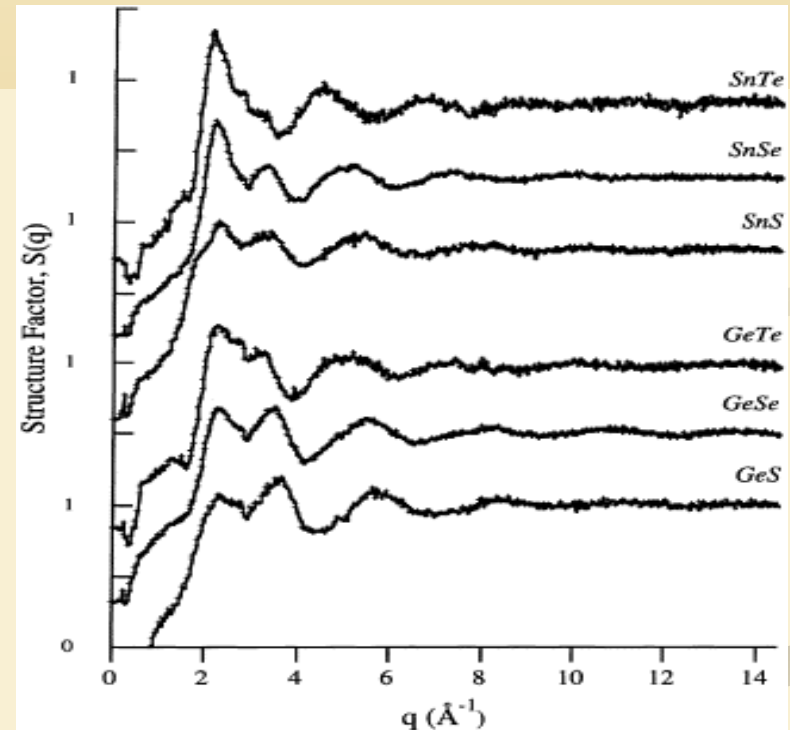
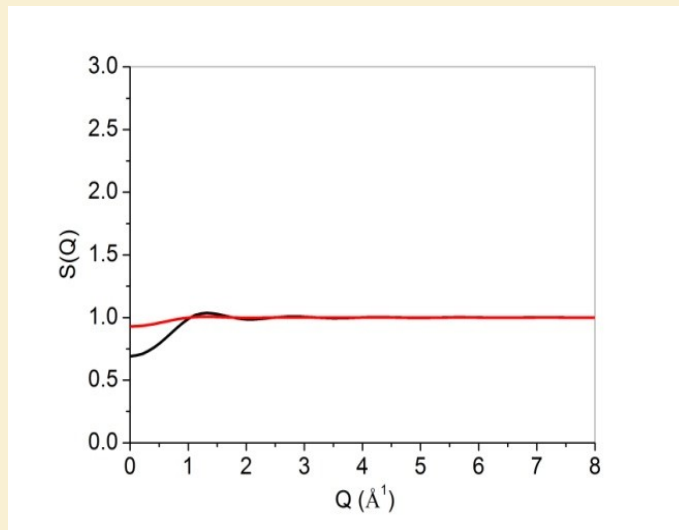
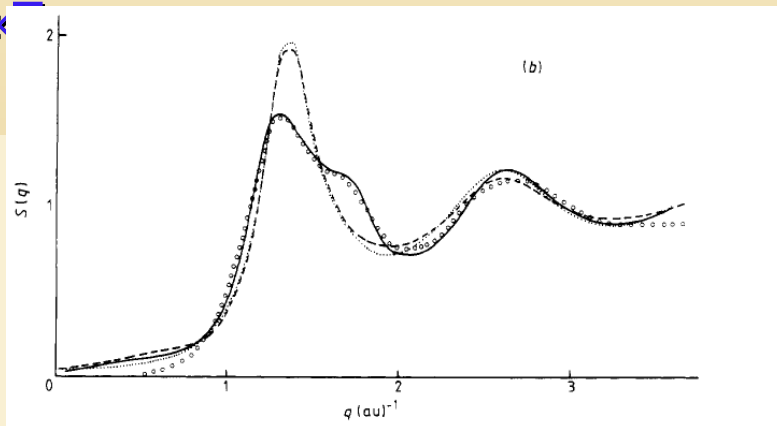
Жидкость - «твёрдая»

Коллективные возбуждения

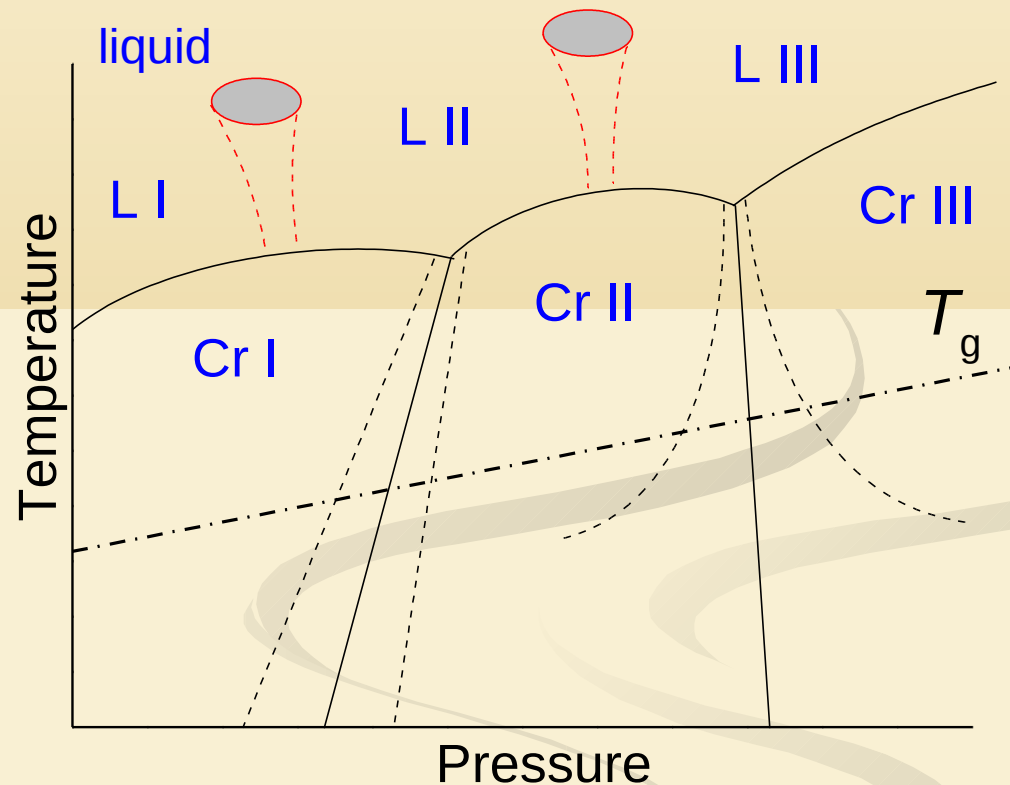
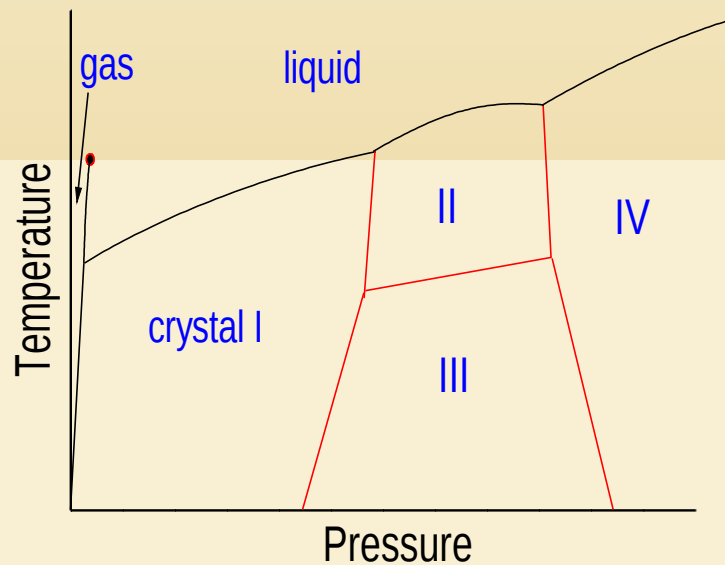
феноменного типа



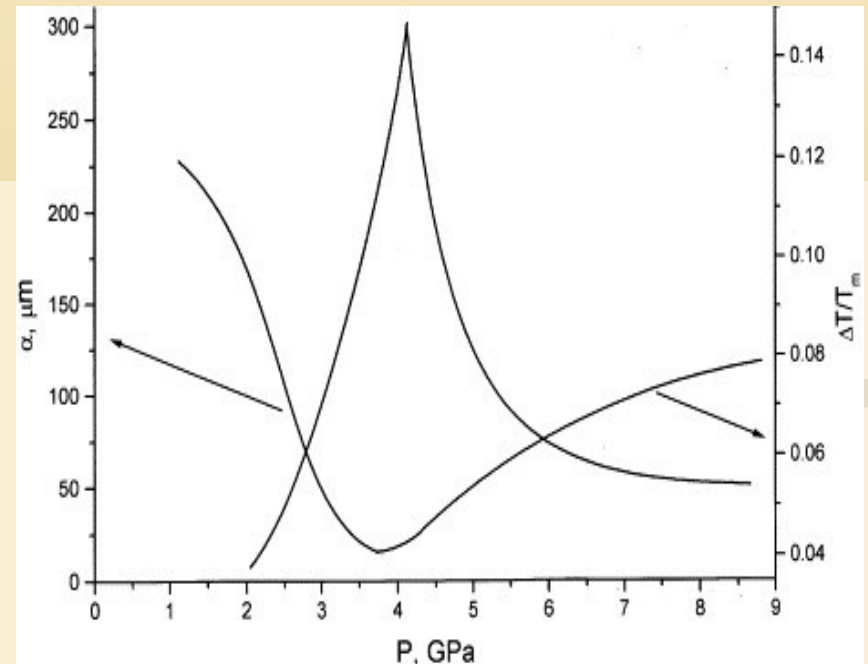
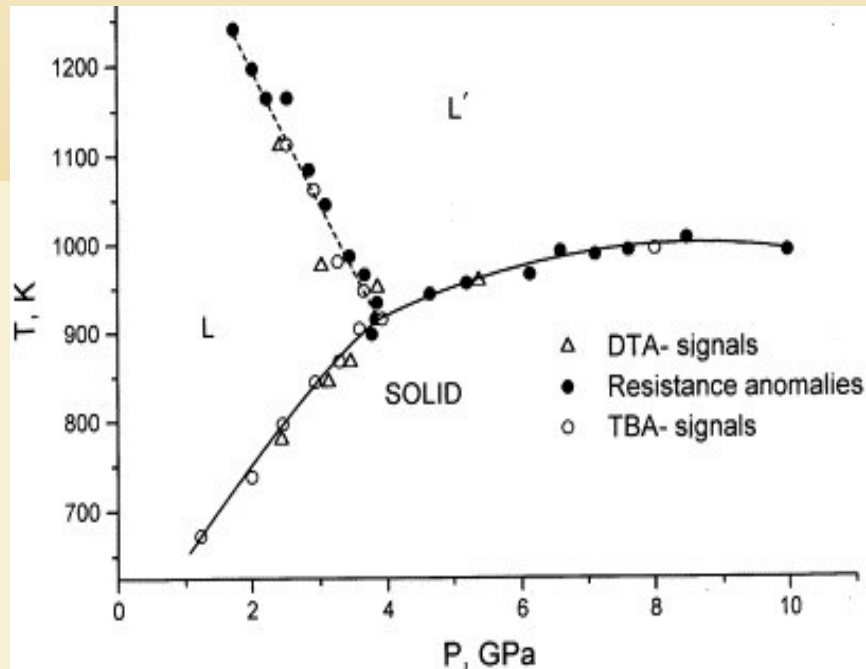
- 1) Плотность
- 2) Ненулевой модуль сдвига на высоких частотах
- 3) Малые скачки большинства свойств при плавлении
- 4) Непрерывный переход в твердое стекло
- 5) Существование ближнего и промежуточного порядка в структуре
- 6) «



Фазовые превращения между модификациями расплава с разным ближним порядком



Фазовый переход полупроводник-металл под давлением в расплаве селена



Резкий фазовый переход первого рода в расплаве фосфора

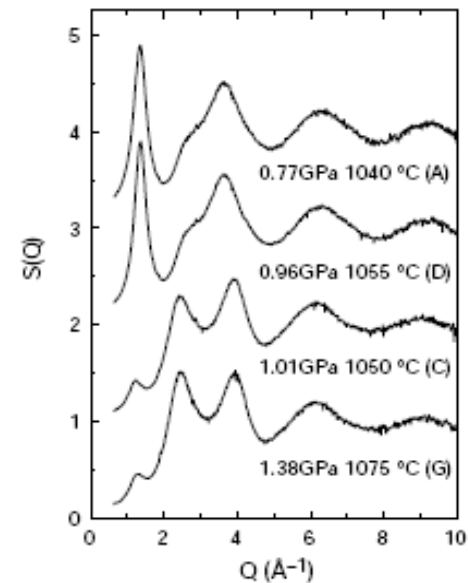
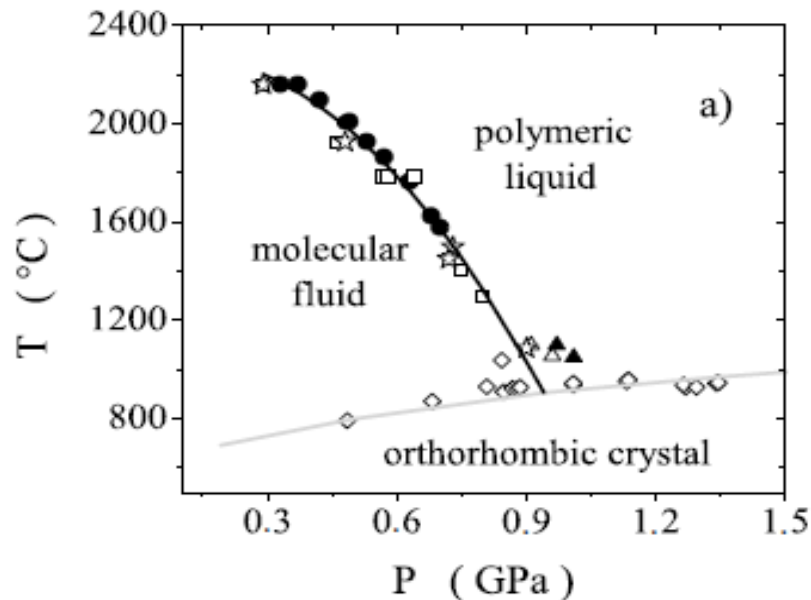
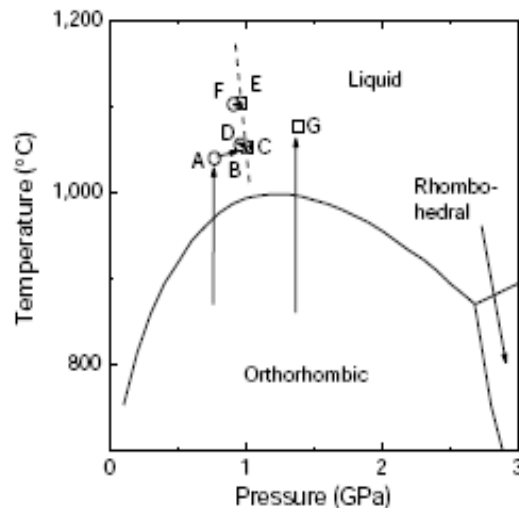


Figure 2 Structure factor, $S(Q)$, for liquid P at several pressures. The letters in parentheses indicate data points in Fig. 1 where the measurements were performed. Energy dispersive X-ray diffraction was performed using white X-rays. To cover a wide wavenumber range, diffraction data were collected at several diffraction angles, from 3.0° to 20.0° . The structure factor $S(Q)$ was obtained using a program developed by Funakoshi³⁰ based on an empirical method proposed by Tsuji¹⁶.

Макроскопическое разделение фаз как свидетельство фазового перехода I-го рода -расплав фосфора

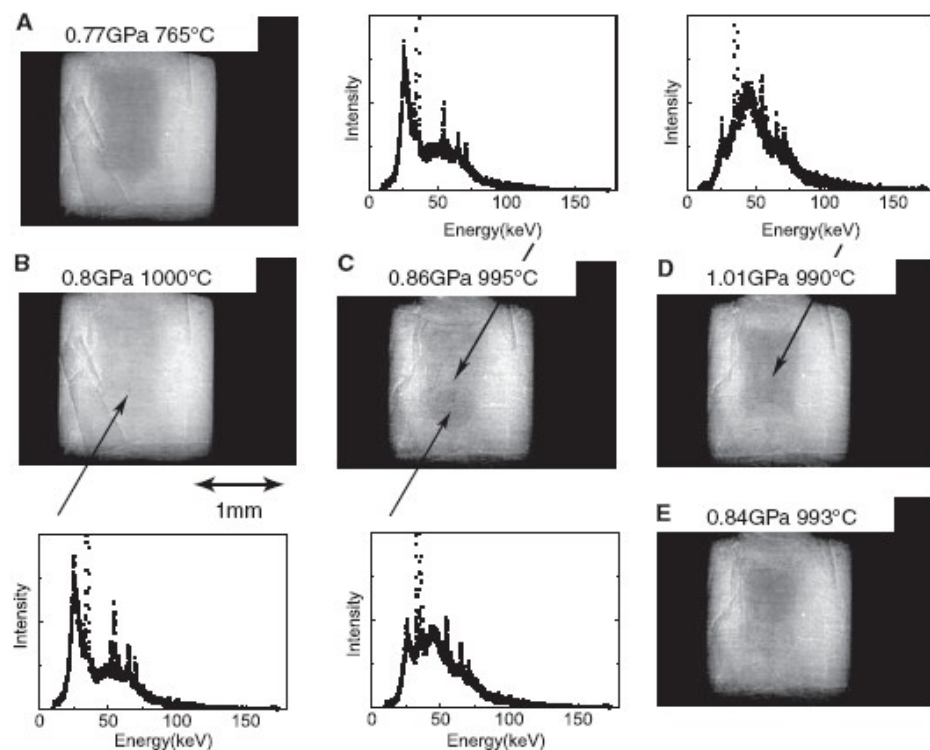


Fig. 1. Radiographs for phosphorus at various pressures and temperatures. Insets indicate x-ray diffraction patterns measured at the positions indicated by the arrows. (A) Black P at 0.77 GPa and 765°C. (B) Low-density fluid phosphorus (LDFP) at 0.8 GPa and 1000°C. (C) A drop of high-density liquid phosphorus (HDLP) in LDLP at 0.86 GPa and 995°C upon compressing. (D) The sample space filled with HDLP at 1.01 GPa and 990°C. (E) A drop of HDLP in LDLP at 0.84 GPa and 993°C upon decompressing. The x-ray aperture was restricted by the anvils. Sharp lines in the radiographs are probably due to textures in the sample assembly.

REPORTS

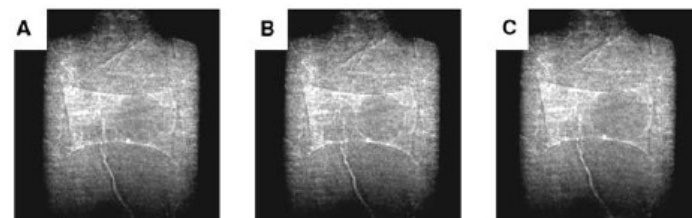


Fig. 2. Snapshots of drops of HDLP in LDLP during the transition. A sample container made of pyrophyllite was used. (A) There are a large drop and several small drops. (B) One of the small drops grew into a large drop, and the two large drops are side by side. (C) The two drops coalesced to form a larger drop.

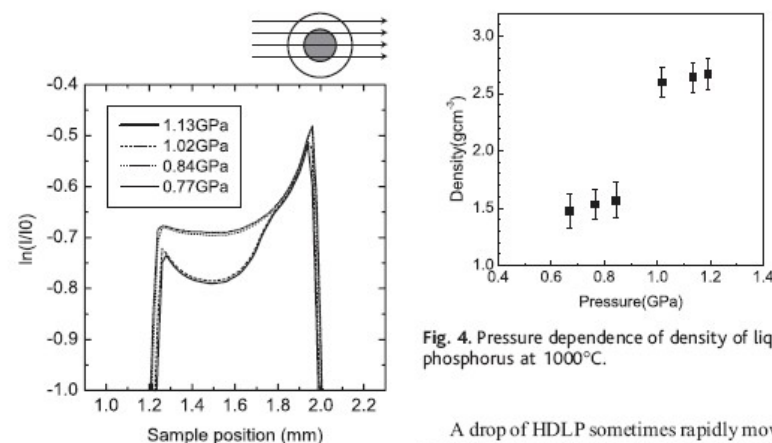


Fig. 3. X-ray absorption profile of liquid phosphorus in a sapphire ring at various pressures and 1000°C. The scan was along an axis parallel to the ring as shown in the upper figure.

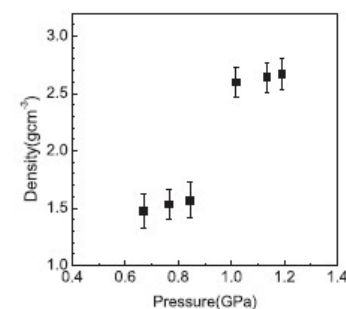


Fig. 4. Pressure dependence of density of liquid phosphorus at 1000°C.

A drop of HDLP sometimes rapidly moved in LDLP and would move from one end of the capsule to the other within a few video frames. LDLP has a low enough viscosity to allow rapid motions, which is consistent with the molecular liquid model. The rapid coa-

Жидкий азот - аналог жидкого фосфора ?

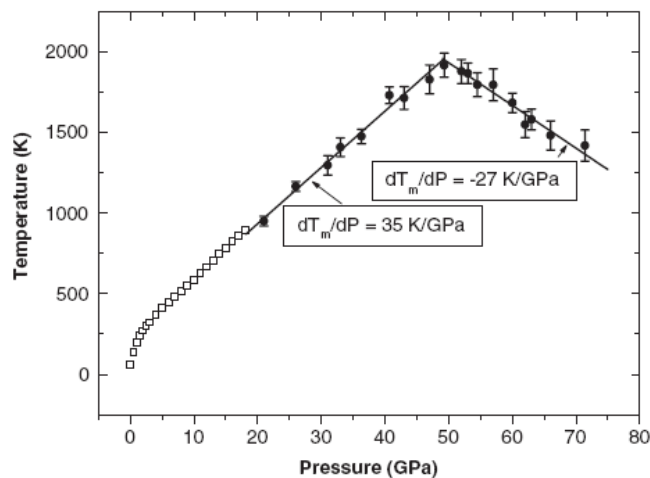
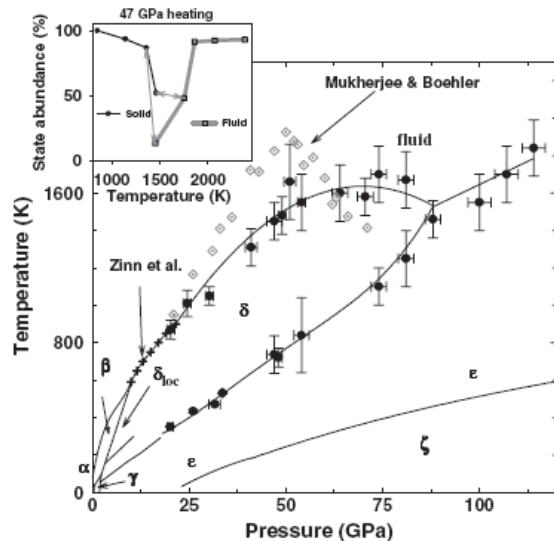


FIG. 2. Melting temperatures of nitrogen at high pressures up to 71 GPa. Dots are data from this work. Open squares are data from Young *et al.* [15]. Solid lines are linear least square fits to our data.



VIEW LETTERS

week ending
30 NOVEMBER 2007

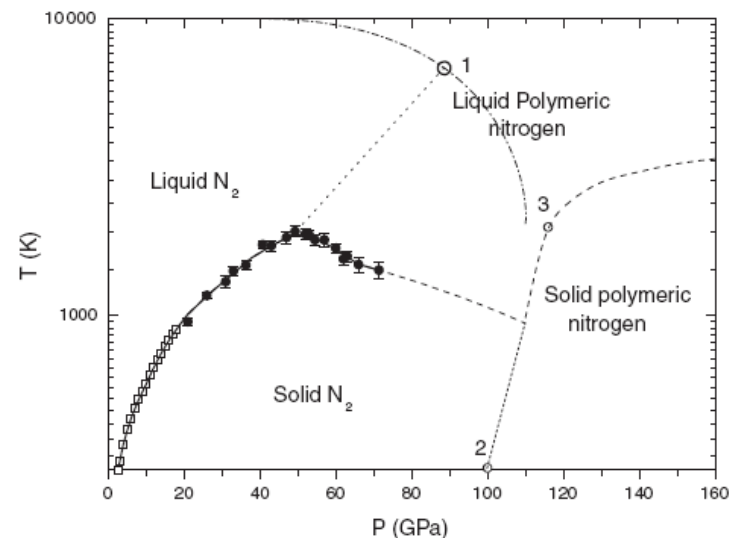
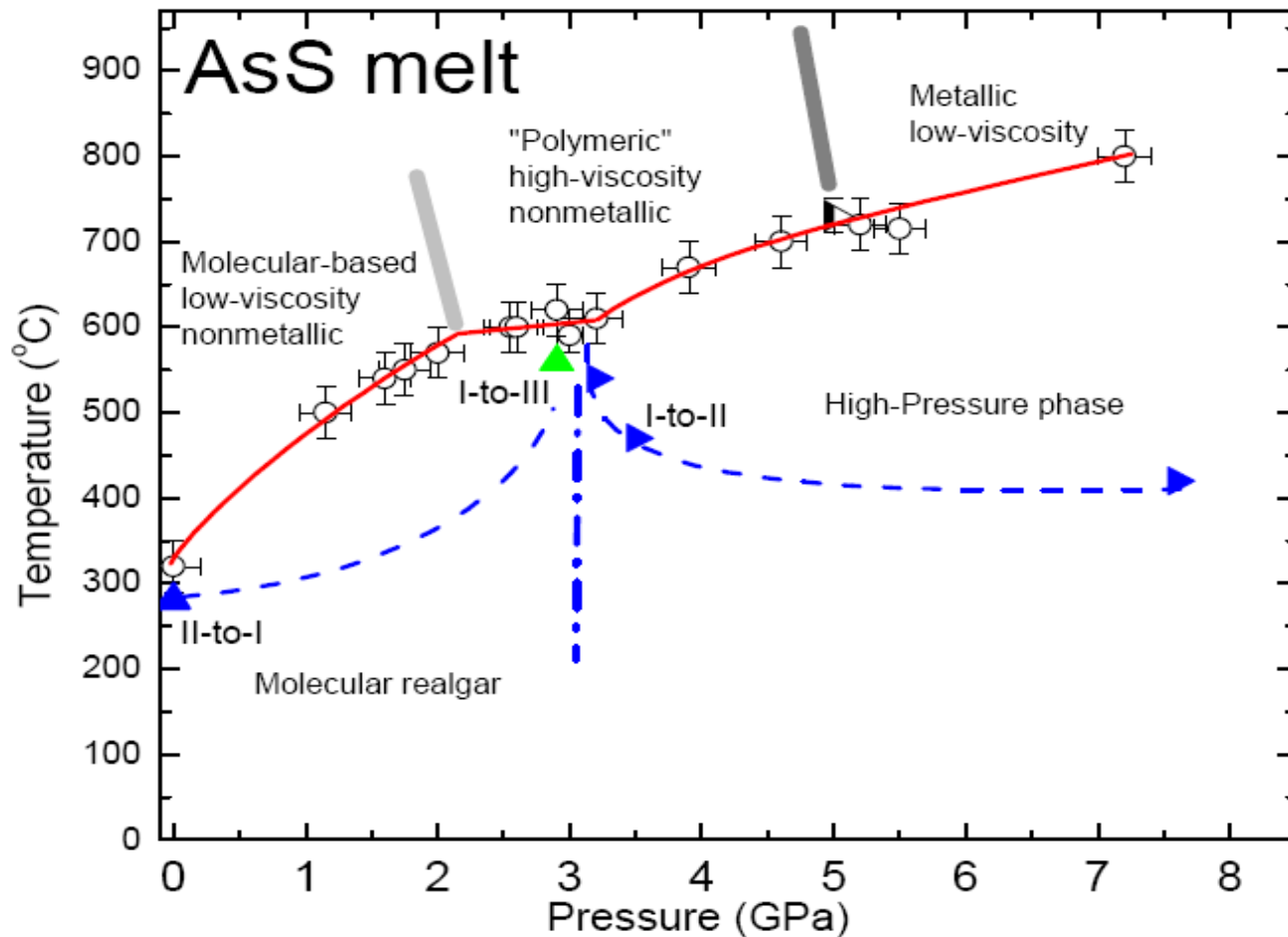


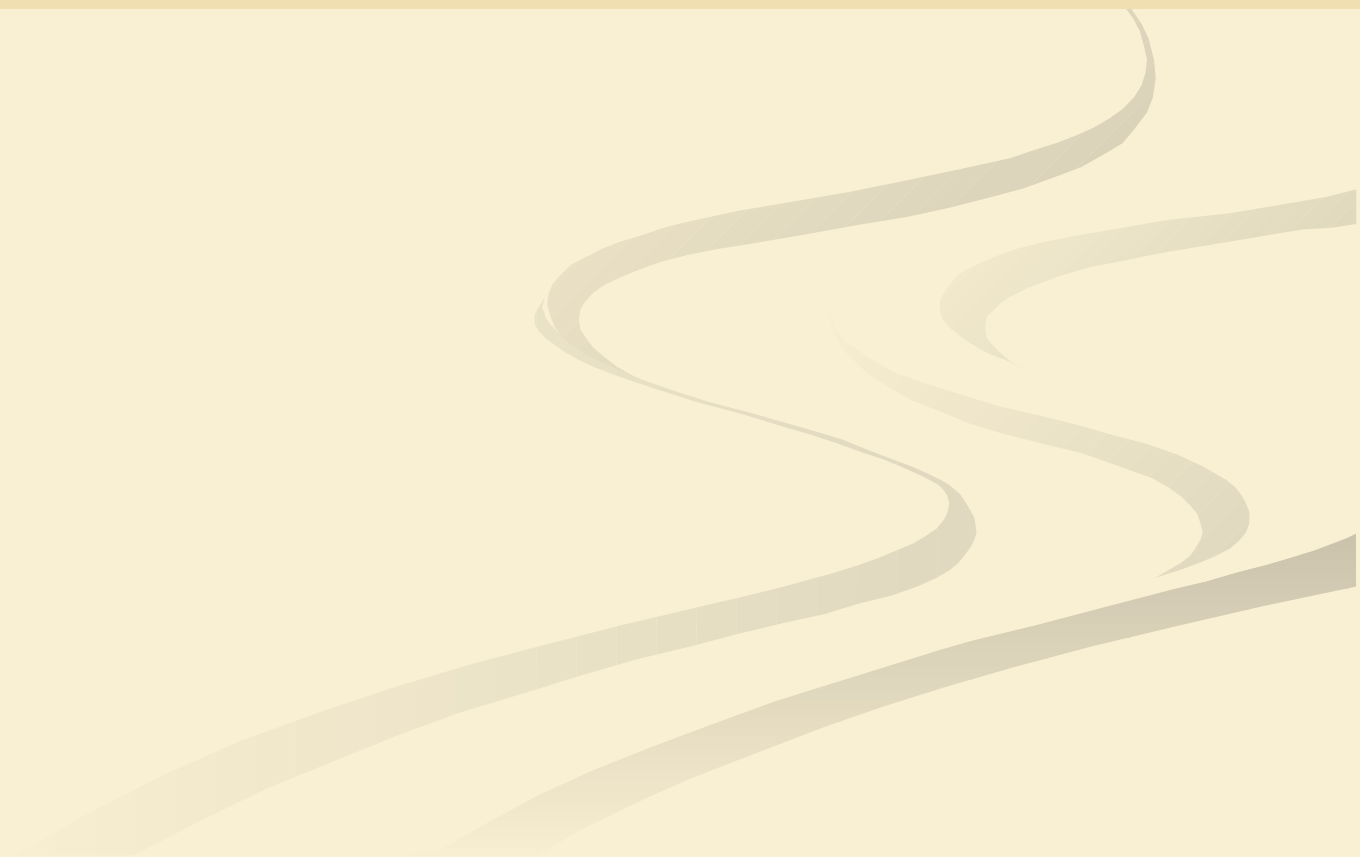
FIG. 3. Proposed nitrogen phase diagram. The solid line traces the experimental melting curve with results from this work (closed circles) and from Young *et al.* [15] (open squares). The reported molecular liquid to polymeric liquid transition is shown by the dot-dash curve [10], which passes through the point labeled 1 at 90 GPa and 7000 K. The modified liquid to liquid transition line is shown by the dotted line, which connects the observed melting-curve maximum to the point 1. The experimental melting curve is extrapolated up to 110 GPa, the transition pressures for the formation of the cg-N structure. The solid molecular nitrogen to the solid polymeric nitrogen transition is denoted by the short-dashed line. The point labeled 2 is the equilibrium pressure of the transition between molecular and nonmolecular nitrogen [8]. The dashed line gives the probable melting line for the polymeric nitrogen which passes through 2000 K, which is the melting temperature of nitrogen at 115 GPa, as observed by Erements *et al.* [9].

AsS

Три жидкости в одном соединении



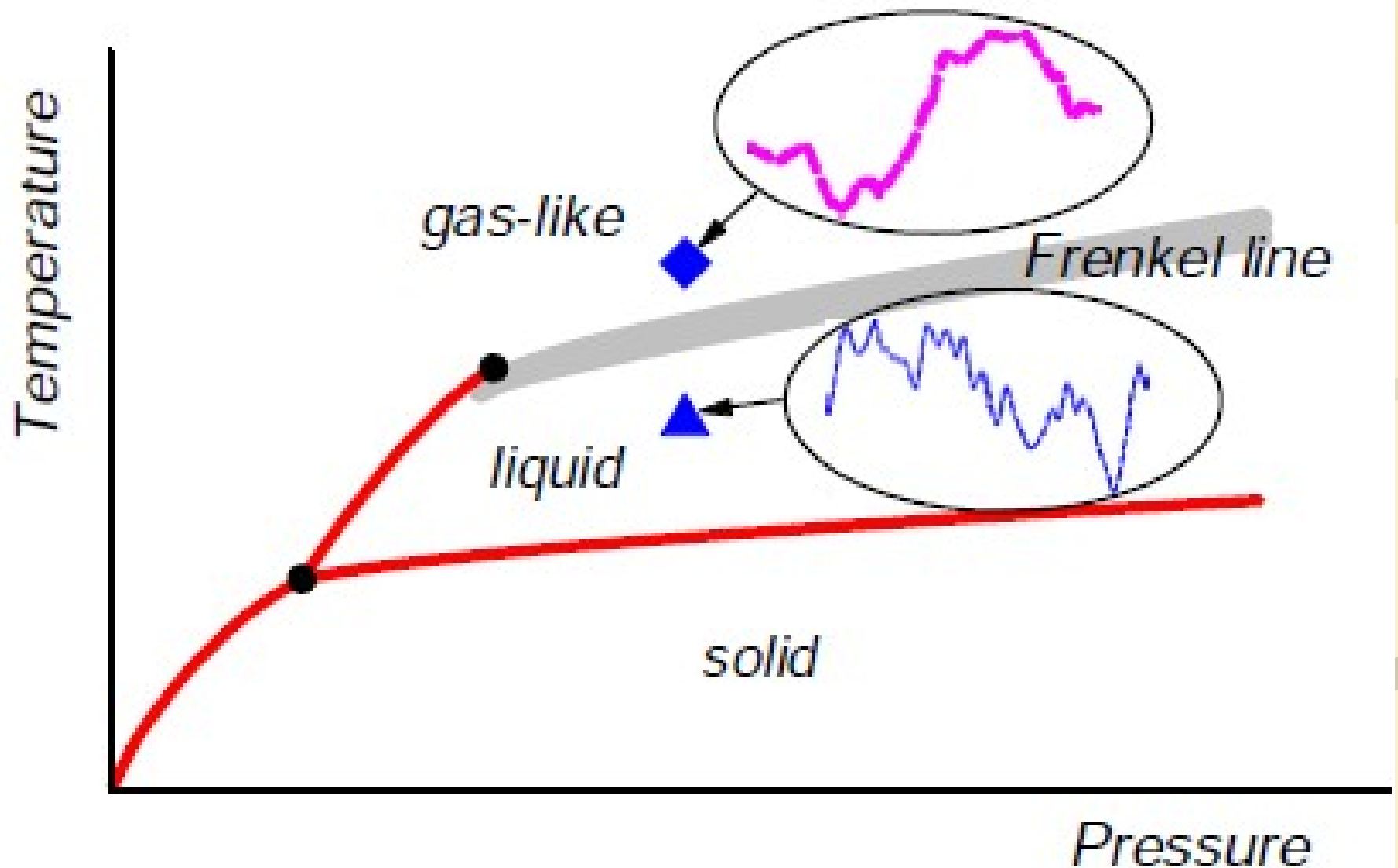
Переход 1го рода в переохлажденной воде



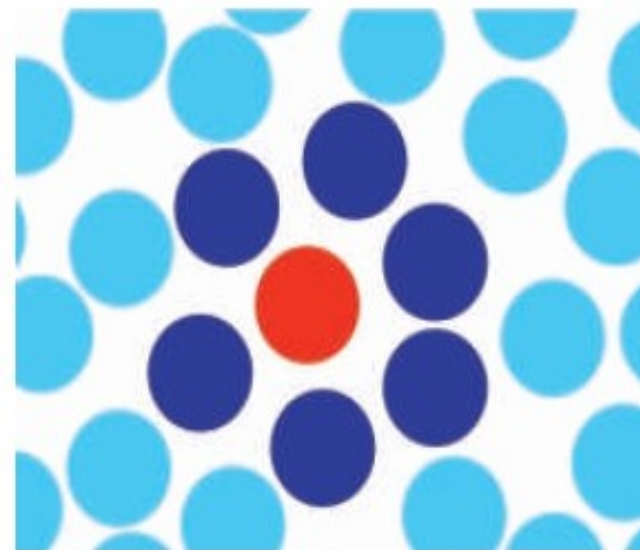
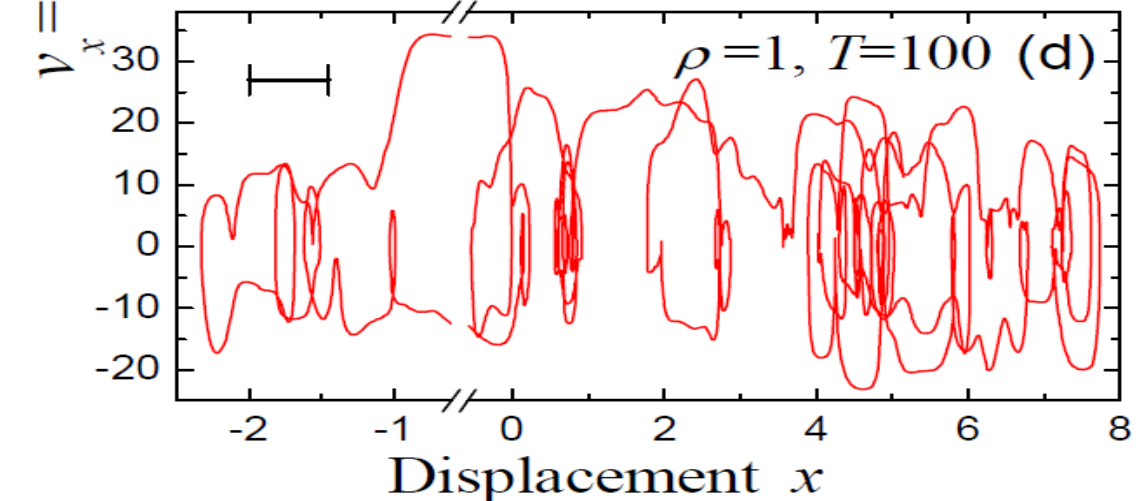
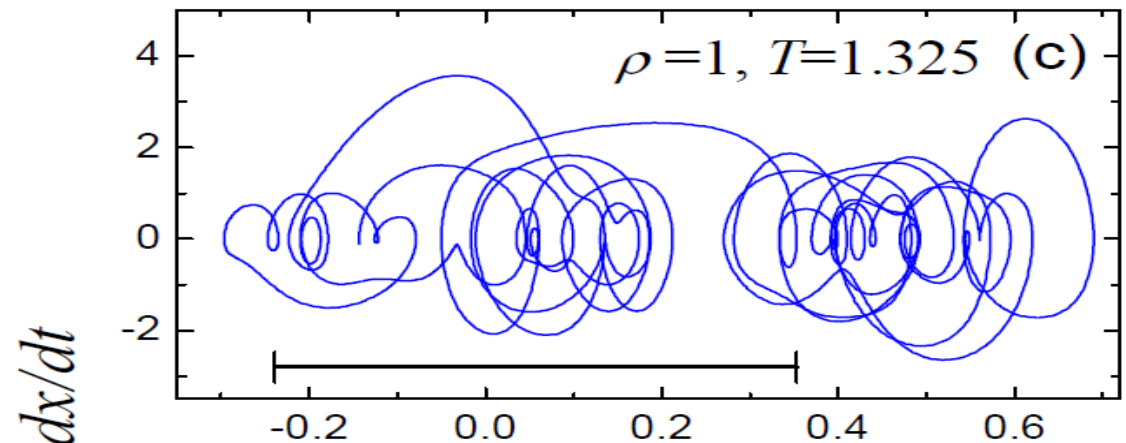
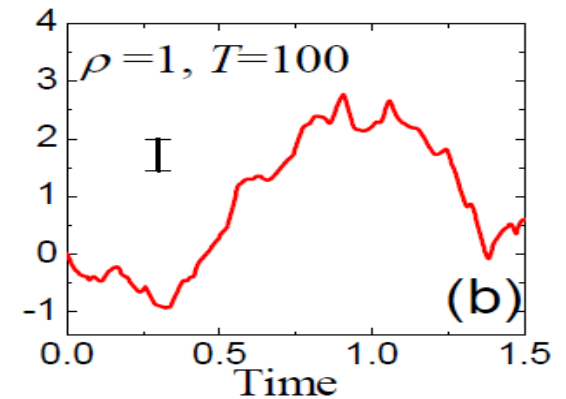
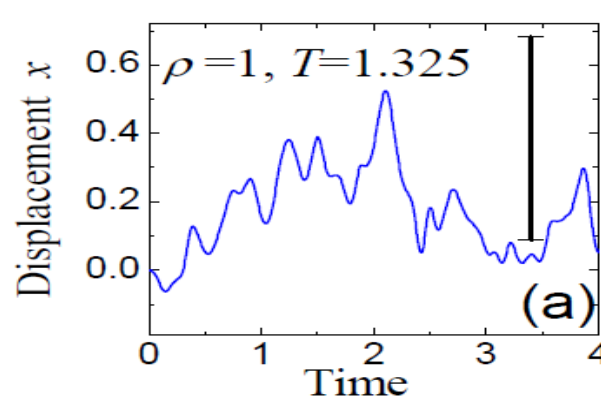
Жидкость - «твёрдая»

Коллективные возбуждения

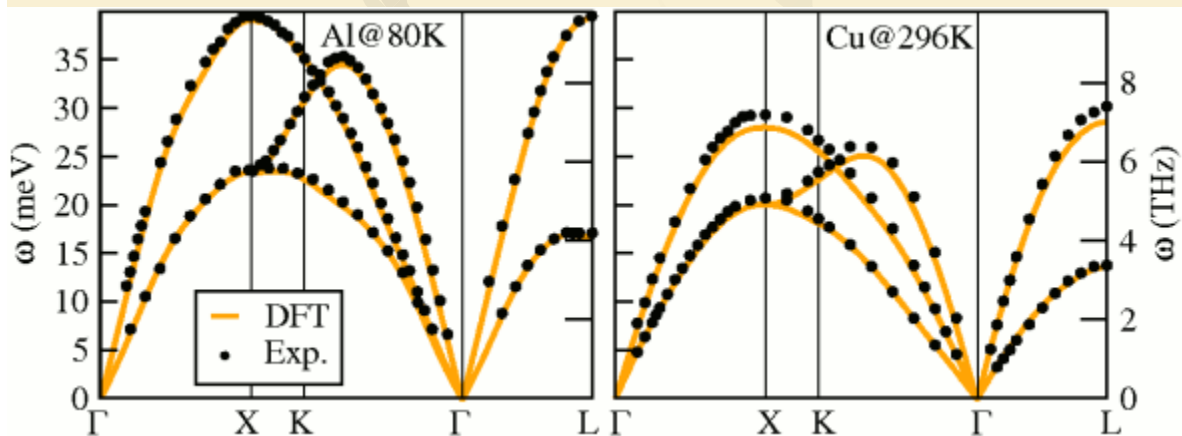
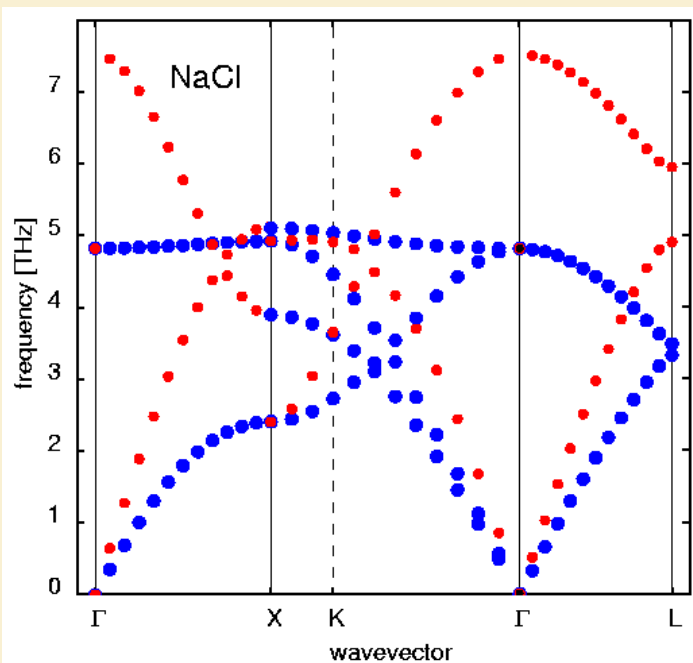
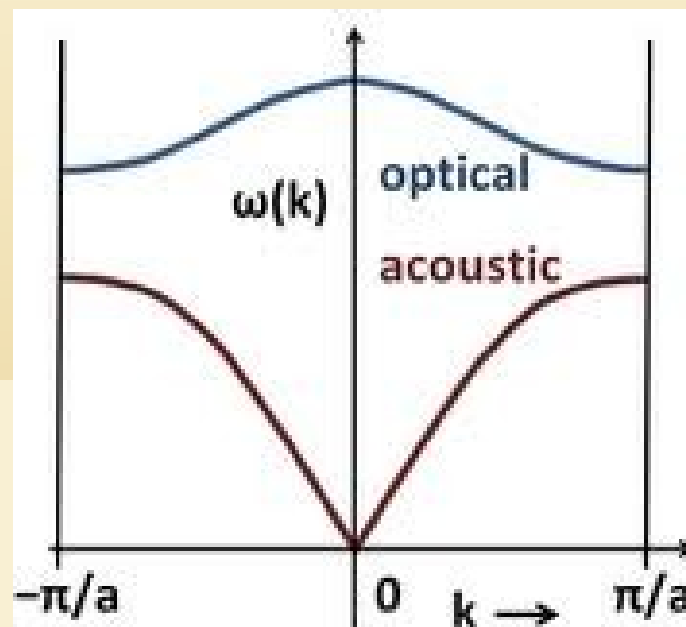
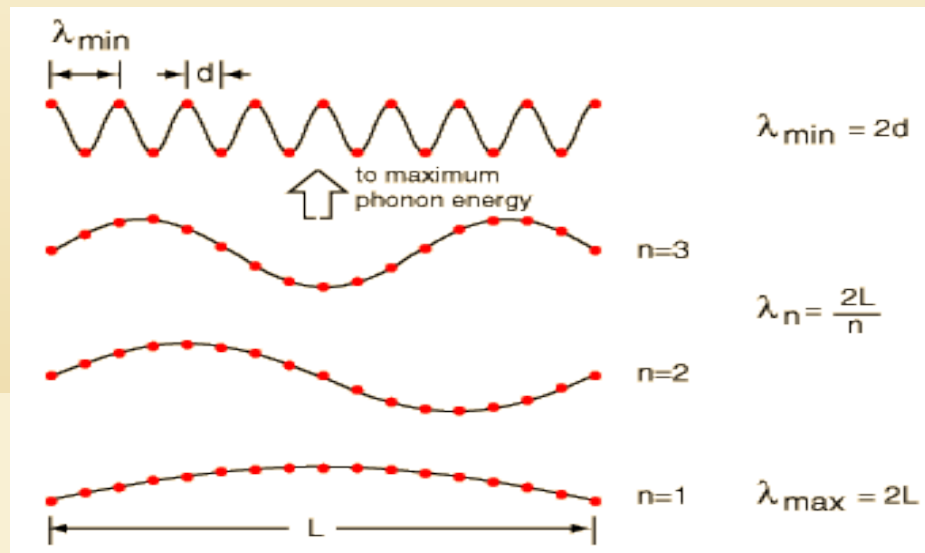
флуктуационного типа



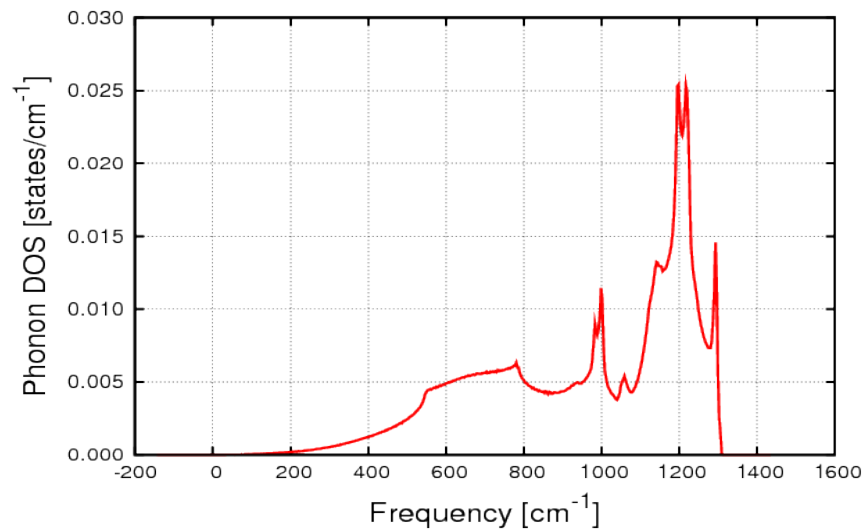
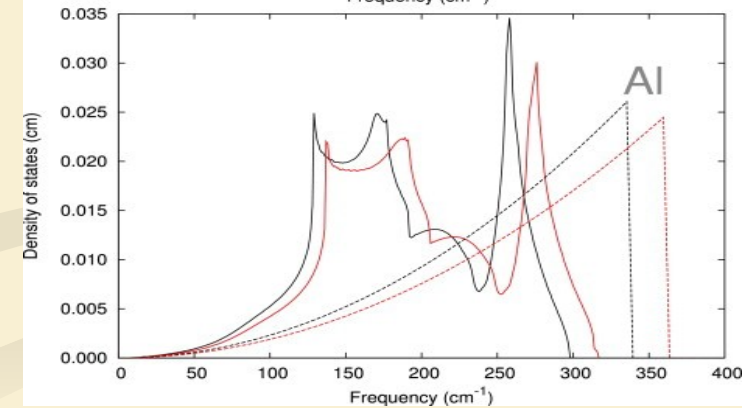
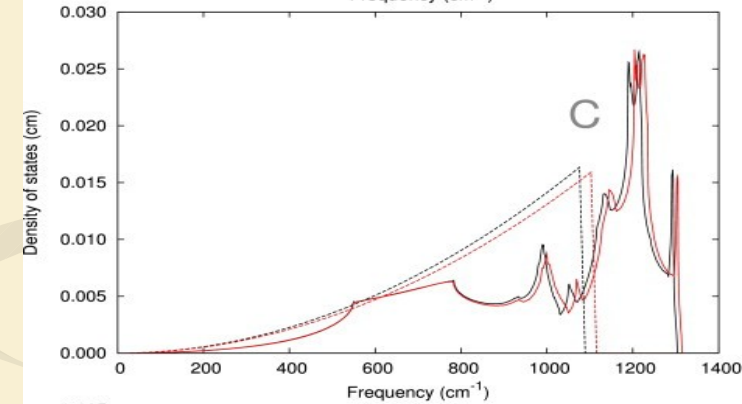
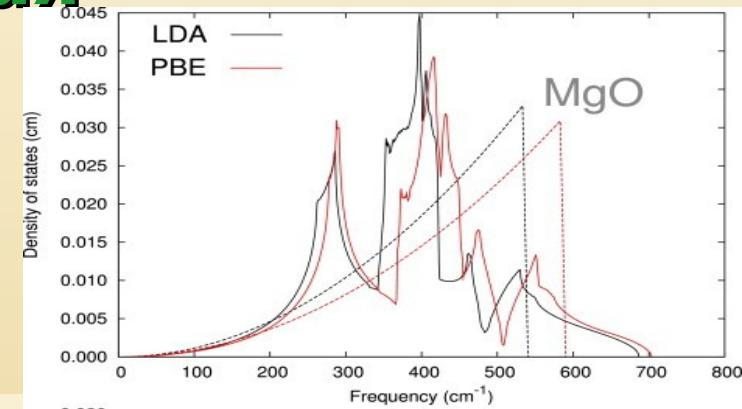
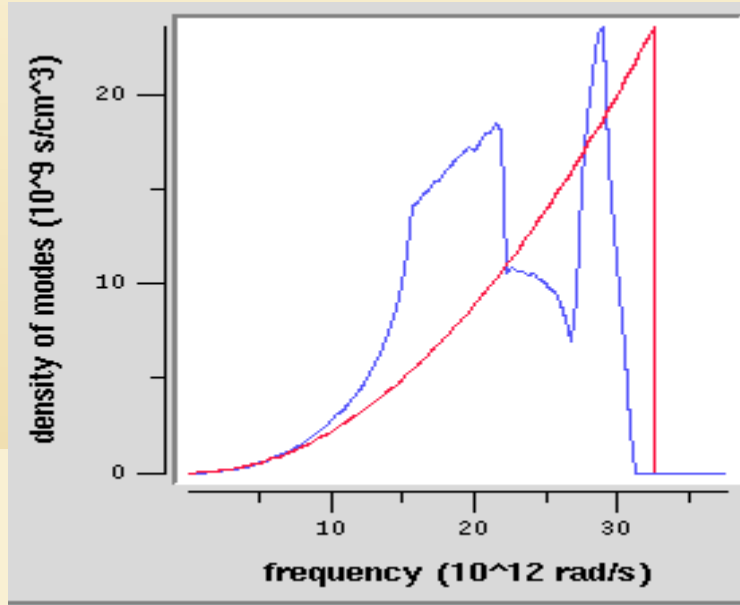
Разная динамика движения частиц в жидкости и газе (при одинаковой плотности!!!)



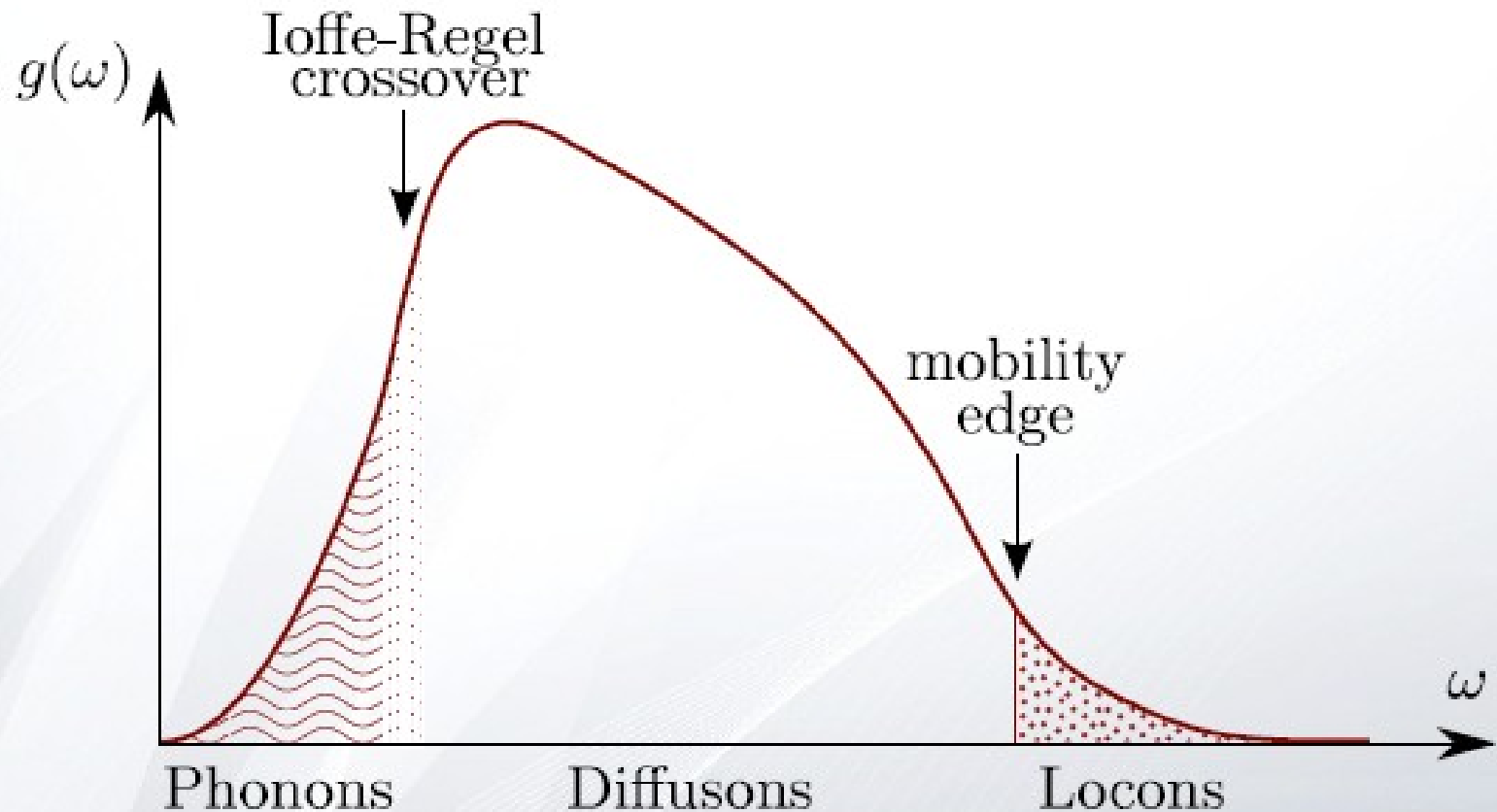
ФОНОНЫ



Плотность фононных состояний и модель Дебая

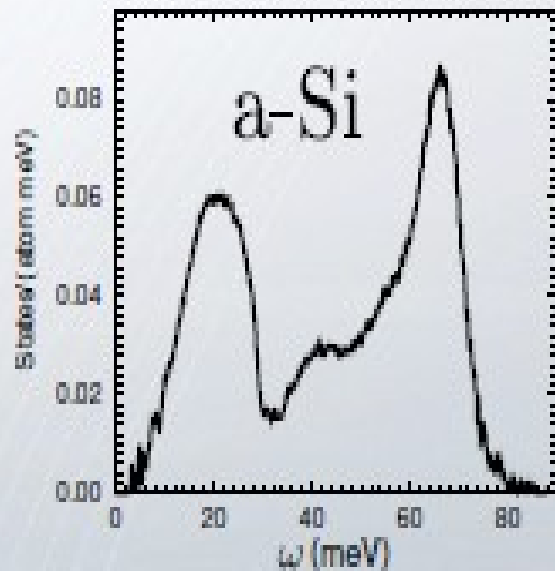


Плотность состояний в жидкостях и стеклах

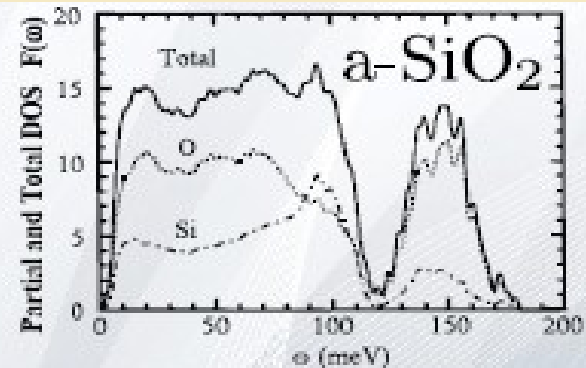


P.B.Allen, J.L.Feldman et al., Phil. Mag. B 79, 1715 (1999)

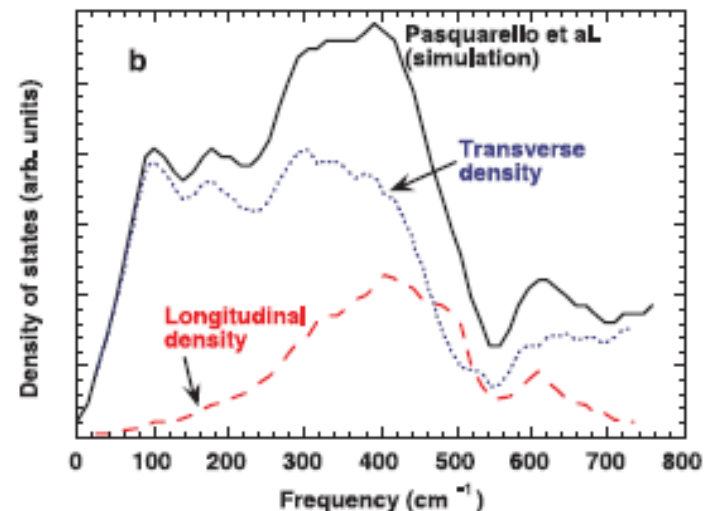
Плотность состояний в жидкостях и стеклах



P.B. Allen, J.L. Feldman, J. Fabian,
F. Wooten. *Phil. Mag. B* **79**, 1715 (1999).



W. Jin, P. Vashishta, R.K. Kalia, J.P. Rino
Phys. Rev. B **48**, 9359 (1993).



любая жидкость имеет сдвиговую жесткость на высоких частотах $\omega > 2\pi/\tau$ (J. Frenkel 1932)

Ультразвук в
глицерине

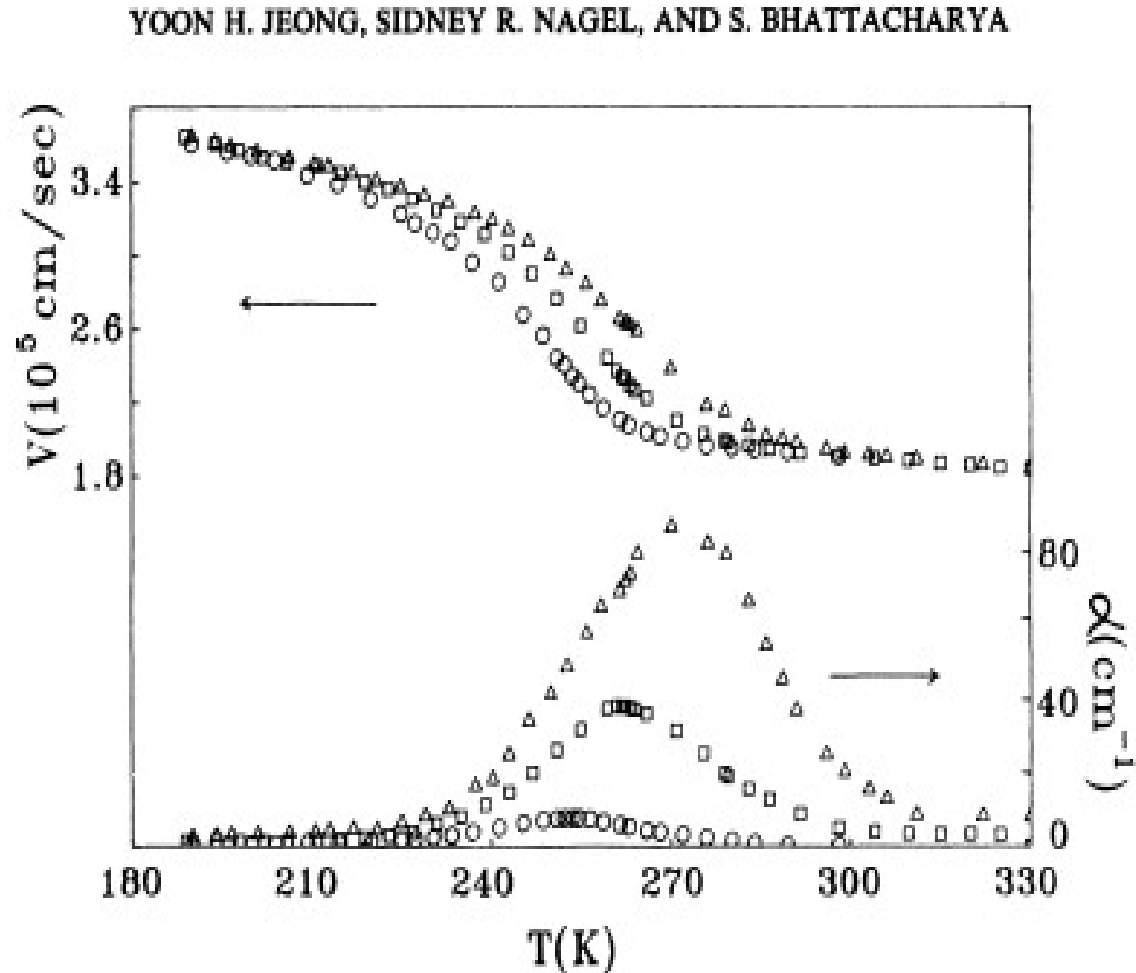


FIG. 2. Plots of velocity v and attenuation α vs temperature T at 2 MHz ($\circ$), 10 MHz ($\square$), and 27 MHz ($\triangle$).

Сдвиговая жесткость и поперечный звук в жидком галлии

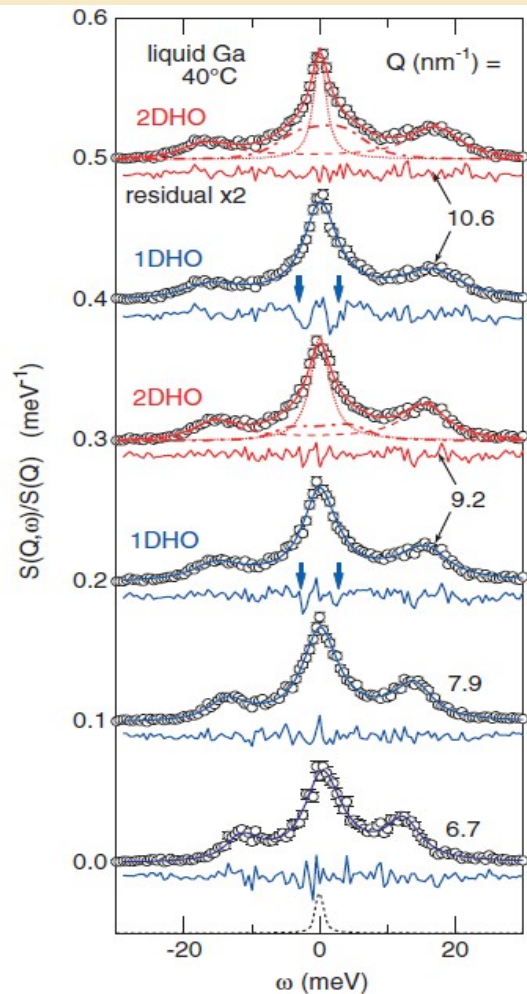


FIG. 1 (color online). $S(Q, \omega)/S(Q)$ at $Q = 6.7\text{--}10.6\text{ nm}^{-1}$ (circles with error bars) together with the resolution function (dashed curve at the bottom). Solid curves indicate the best fits and residuals of 1DHO and 2DHO models. See the text for details.

PRL 102, 105502 (2009)

PHYSICAL REVIEW

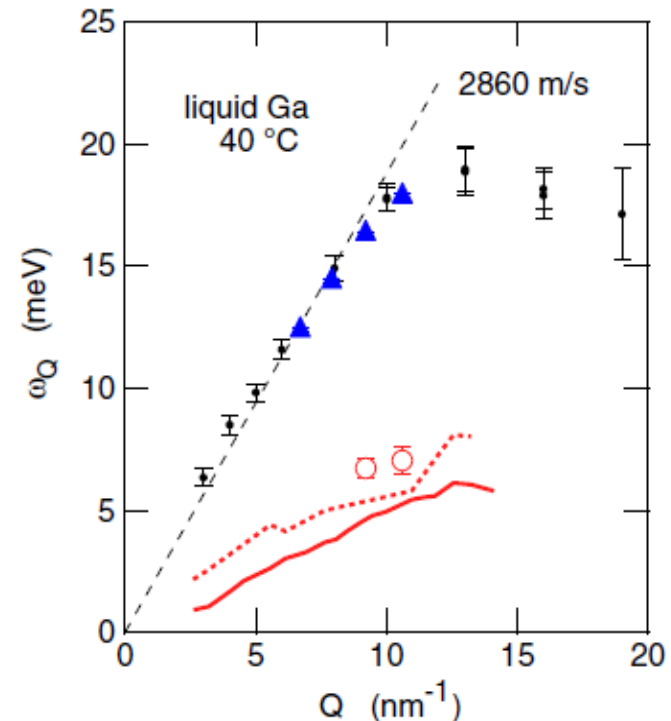


FIG. 2 (color online). Dispersion relation of transverselike (open circles) and longitudinal (solid triangles) modes obtained from the fits. The solid curve gives the peak energies of the transverse current spectra, and the dotted curve is those of the quasitransverse branch seen in the longitudinal current spectra, both obtained by an orbital-free *ab initio* MD simulation. See the text for details.

Shear rigidity – transverse excitations in liquid Na

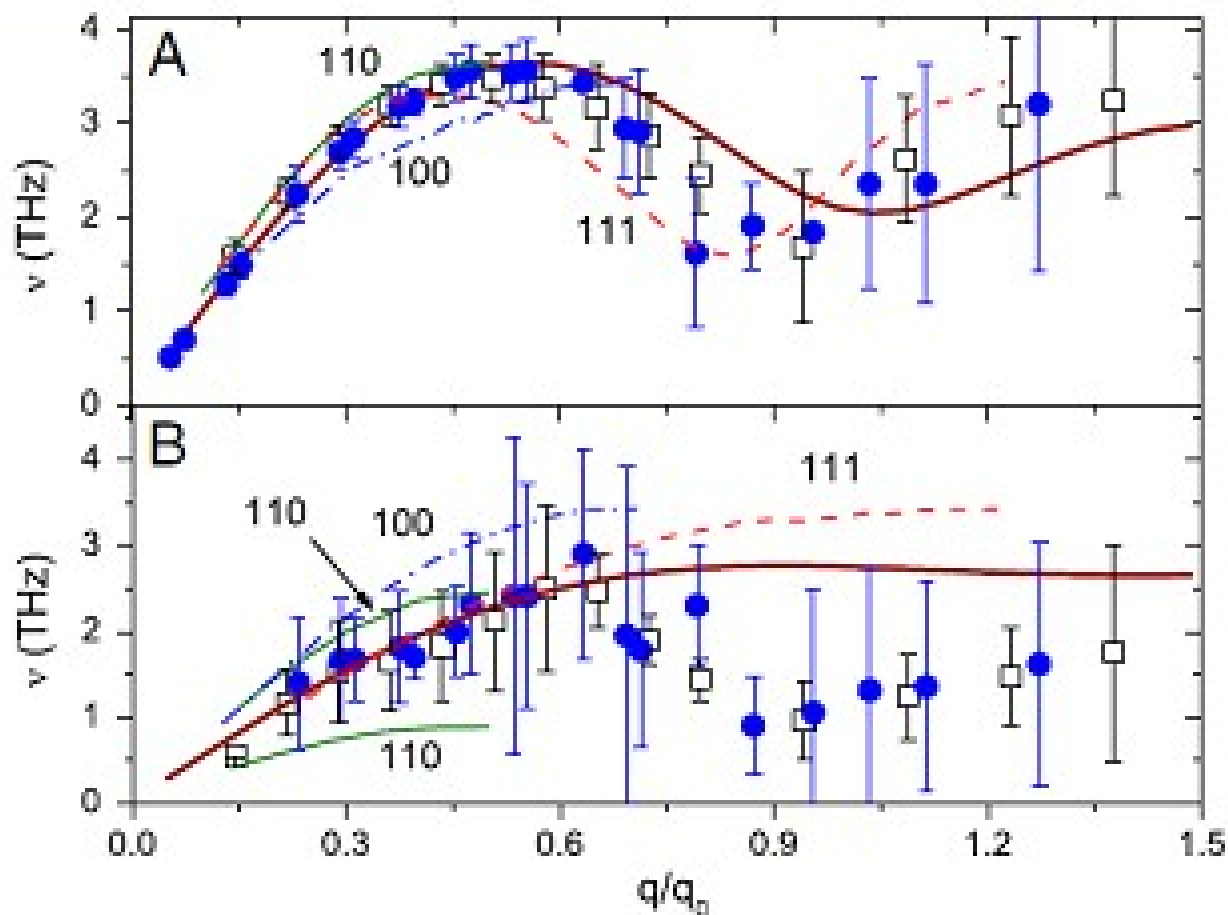
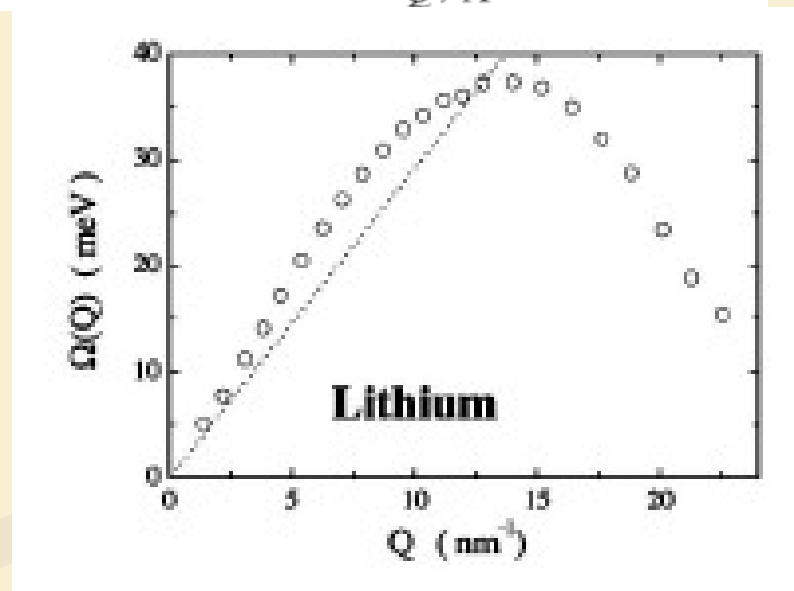
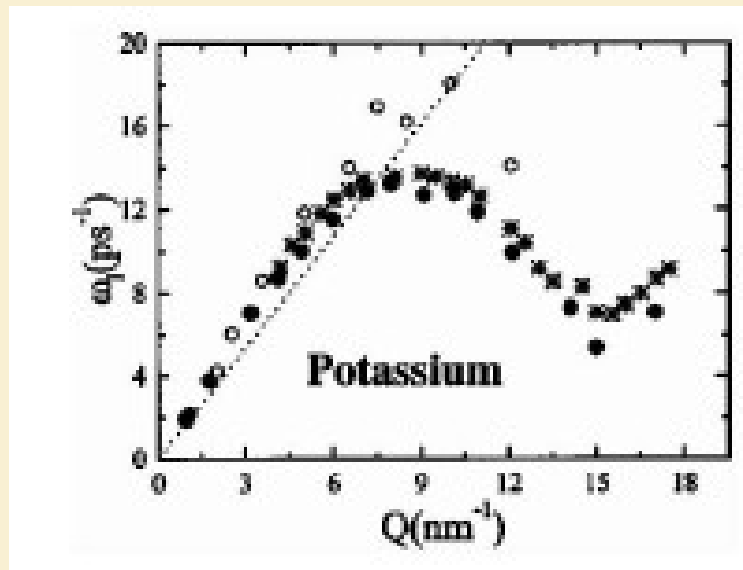
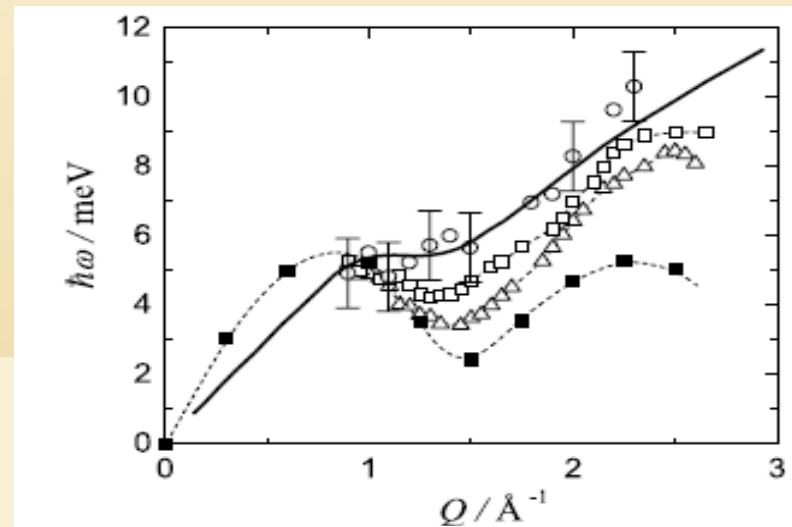
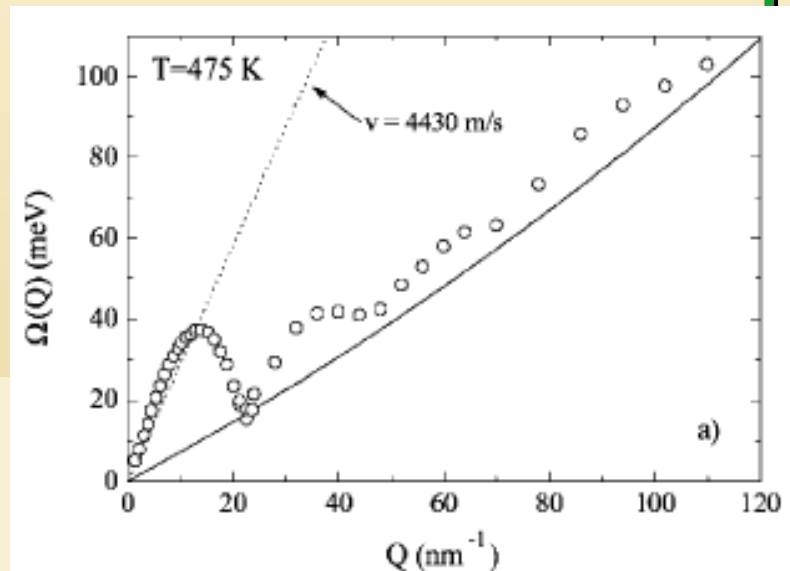


Fig. 3. Effect of the average short-range order on the acoustic dispersion curves of liquid sodium. The frequency position of the longitudinal A and transverse B excitations is reported as a function of q/q_0 for both the polycrystal (squares) and the liquid (bullets), q_0 being the position of the first dif-

Положительная дисперсия звука в жидкостях



Положительная дисперсия звука в жидкостях -Te

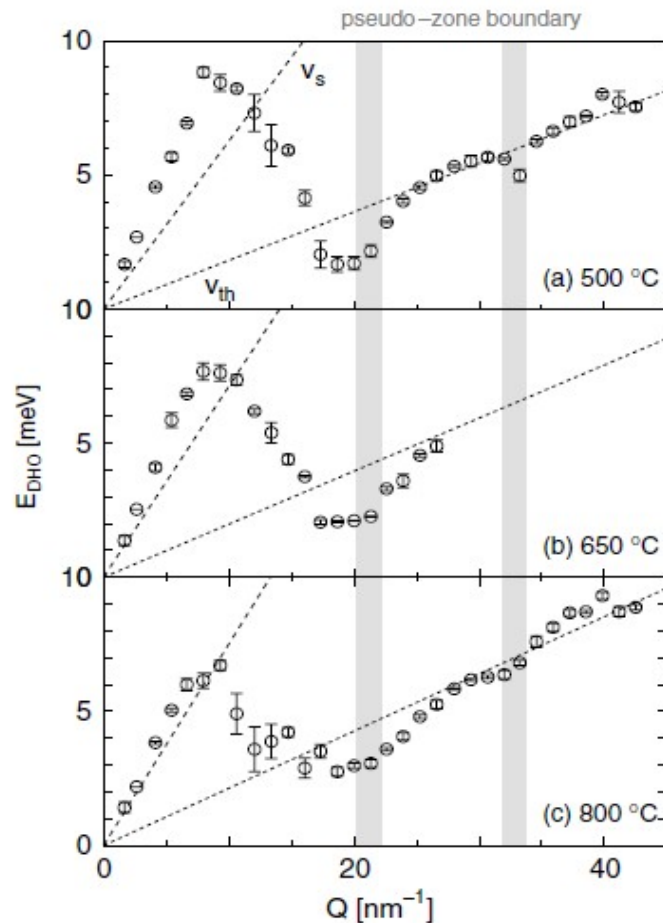


Figure 3. Dispersion curves at (a) 500, (b) 650 and (c) 800 °C. Open circles are from the present IXS experiments, and dashed lines and dotted lines are the ones from the ultrasonic sound velocities [7] and thermal velocities of atoms.

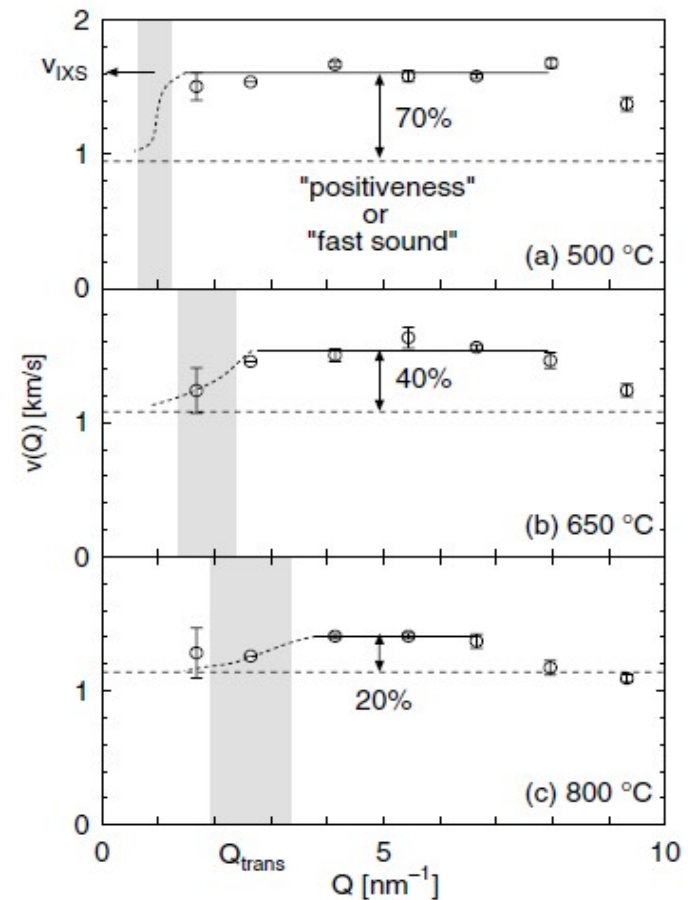
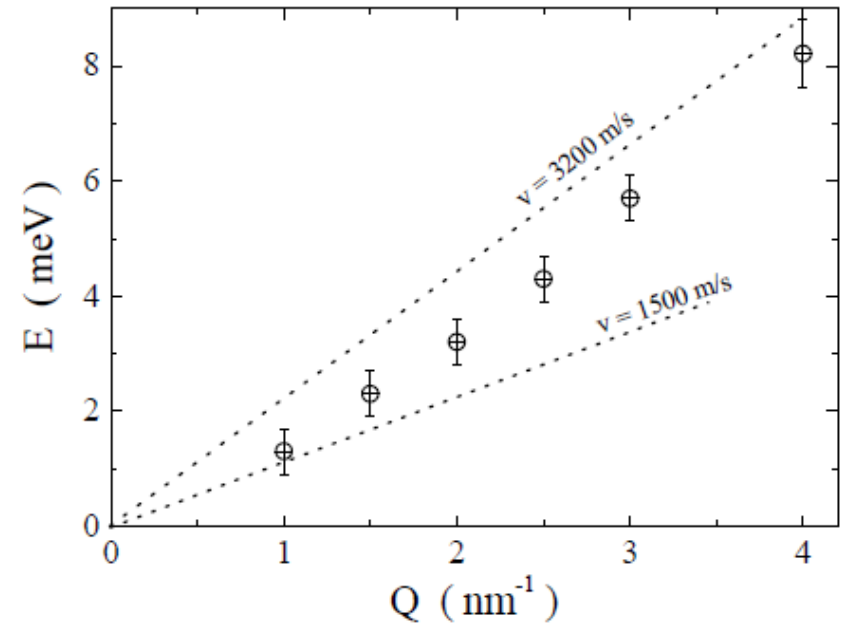
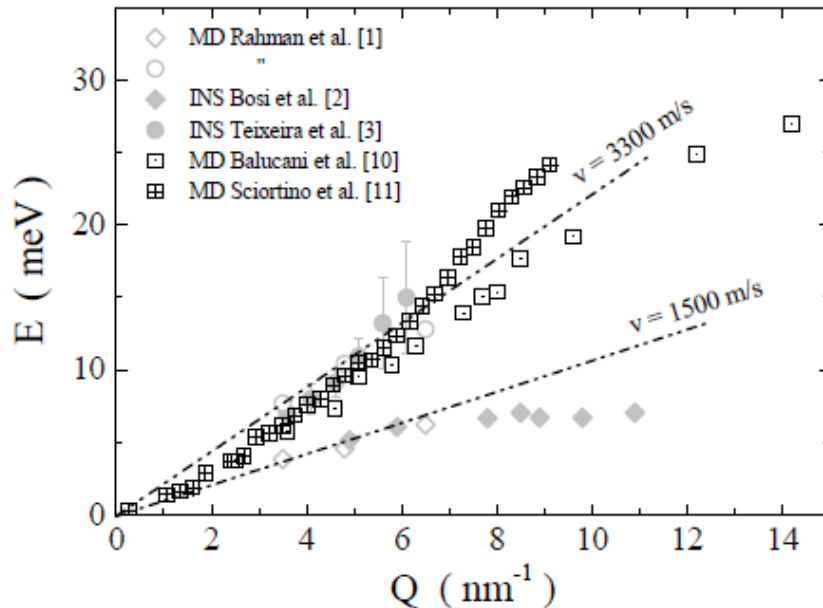


Figure 4. Open circles indicate the dependences on Q of the phase velocity $v(Q)$ at (a) 500, (b) 650 and (c) 800 °C. $v(Q)$ changes from the high frequency value v_{IXS} to the ultrasonic one v_s in the Q_{trans} region (hatched area). We define the *positiveness* as the normalized difference between v_{IXS} and v_s .

Положительная дисперсия звука в жидкостях – вода



speed of sound increases from $(B/\rho)^{1/2}$ to $[(B + 4G/3)/\rho]^{1/2}$

Жидкий He

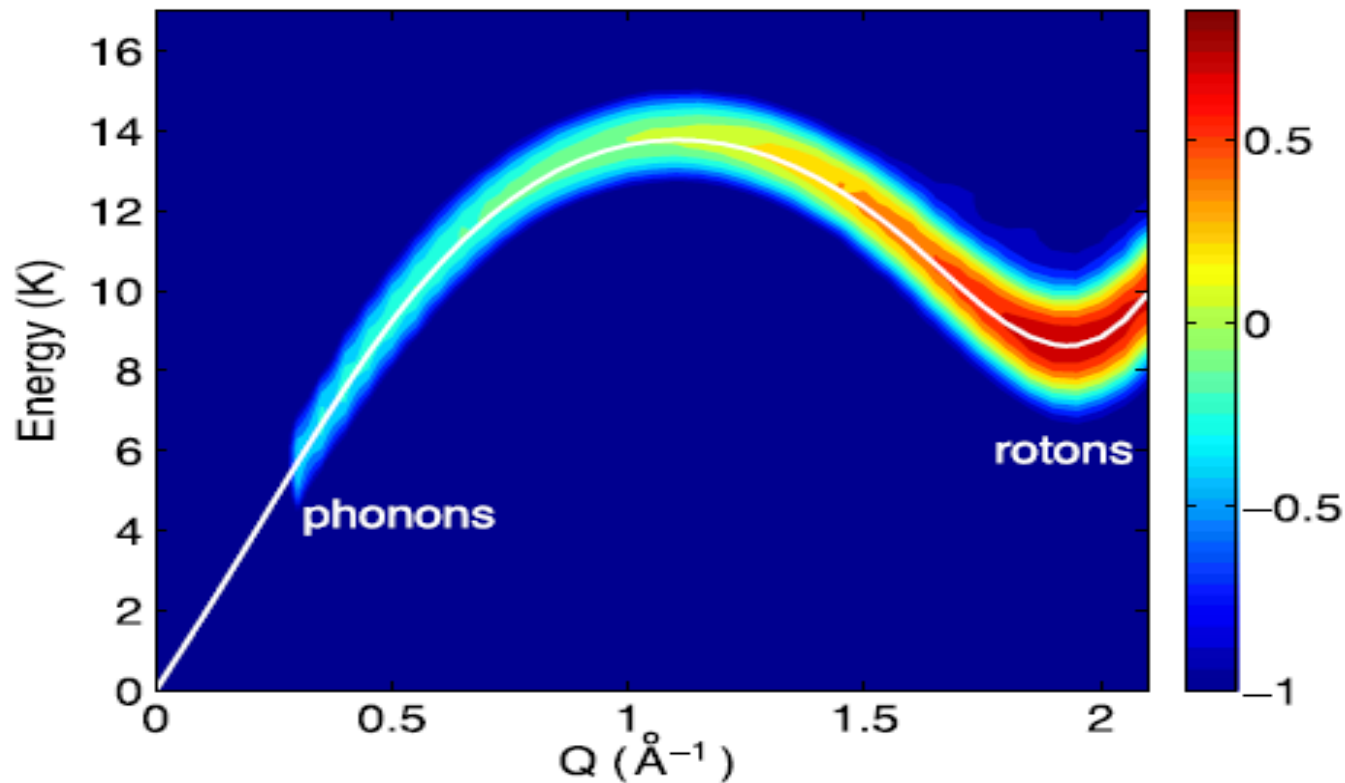


FIG. 1 (color online). The neutron scattering intensity in superfluid ^4He at saturated vapor pressure and $T = 1.3 \text{ K}$ on a logarithmic scale as a function of wave vector Q and energy, from Ref. [1]. The line shows the dispersion of the quasiparticles, corresponding to phonons at small wave vectors Q and rotons near the local minimum at $Q_R \approx 1.93 \text{ \AA}^{-1}$ and energy $\Delta/k_B \approx 8.6 \text{ K}$.

Квазифононы в стеклах и жидкостях – теория

Hubbard and Beeby [11] have derived the expression for the longitudinal phonon frequencies $\omega_L(q)$ and the transverse phonon frequencies $\omega_T(q)$ as [11,12],

$$\omega_L^2(q) = \omega_E^2 \left[1 - \frac{3 \sin(q\sigma)}{(q\sigma)} - \frac{6 \cos(q\sigma)}{(q\sigma)^2} + \frac{6 \sin(q\sigma)}{(q\sigma)^3} \right] \quad (1)$$

and

$$\omega_T^2(q) = \omega_E^2 \left[1 + \frac{3 \cos(q\sigma)}{(q\sigma)^2} - \frac{3 \sin(q\sigma)}{(q\sigma)^3} \right]. \quad (2)$$

Here ω_E represents the maximum phonon frequency and is given as

$$\omega_E = \frac{4\pi\rho}{3M} \int_0^\infty g(r) r^2 \Phi''(r) dr \quad (3)$$

with

$$\Phi''(r) = \frac{4Z^2}{r^3} + \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^\infty F(q) q^2 \left[\frac{2 \sin(qr)}{qr^3} - \frac{2 \cos(qr)}{r^2} - \frac{q \sin(qr)}{r} \right] dq, \quad (4)$$

and

$$g(r) = 1 + \frac{1}{2\pi^2\rho r} \int_0^\infty (S(q) - 1) q \sin(qr) dq. \quad (5)$$

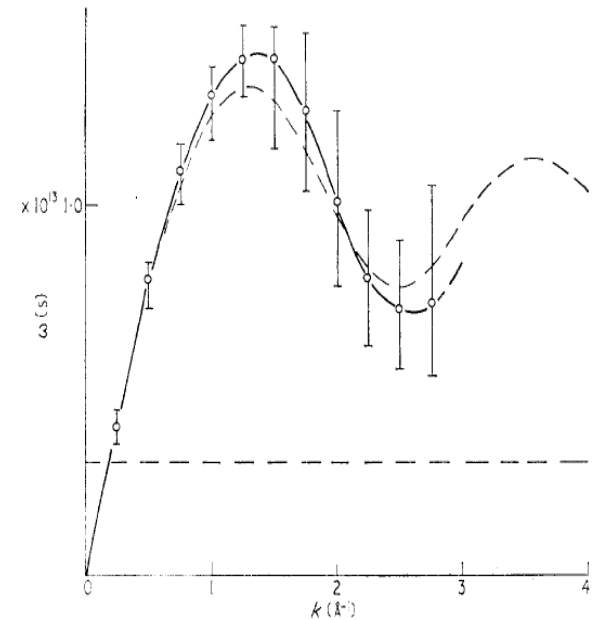


Figure 3. Position of predicted collective peak of $S(k, \omega)$ plotted as a function of k (heavy curve), and ω_c calculated from (48) (broken curve). The width (at half-height) of the collective peak is indicated by the bars. The theory is poor at small ω (below horizontal broken line).

$$\rho_L = \frac{3\pi}{\hbar} \frac{1}{j_F^2} \frac{1}{N} \int_0^1 |v(q)|^2 S(q) 4 \left(\frac{q}{2k_F} \right)^3 d \left(\frac{q}{2k_F} \right)$$

Квазифононы в стеклах и жидкостях - (расчет в гармоническом приближении)

Normal mode analysis of the velocity correlation function in supercooled liquids

B. Madan, T. Keyes, and G. Seeley

Department of Chemistry, Boston University, Boston, Massachusetts 02215

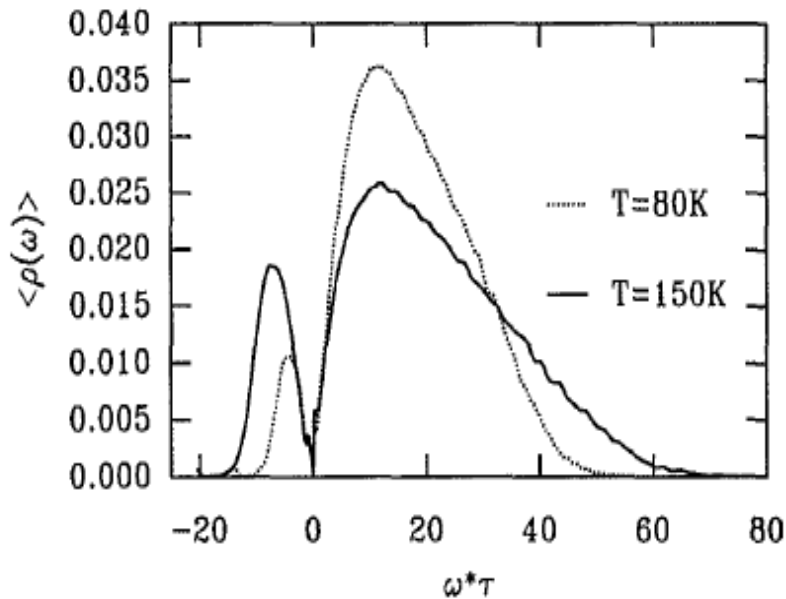


FIG. 1. Configuration averaged densities of states vs $\omega\tau$ ($\tau = 2.15$ ps) at unit density. Solid line is $T = 150$ K, dotted line $T = 80$ K.

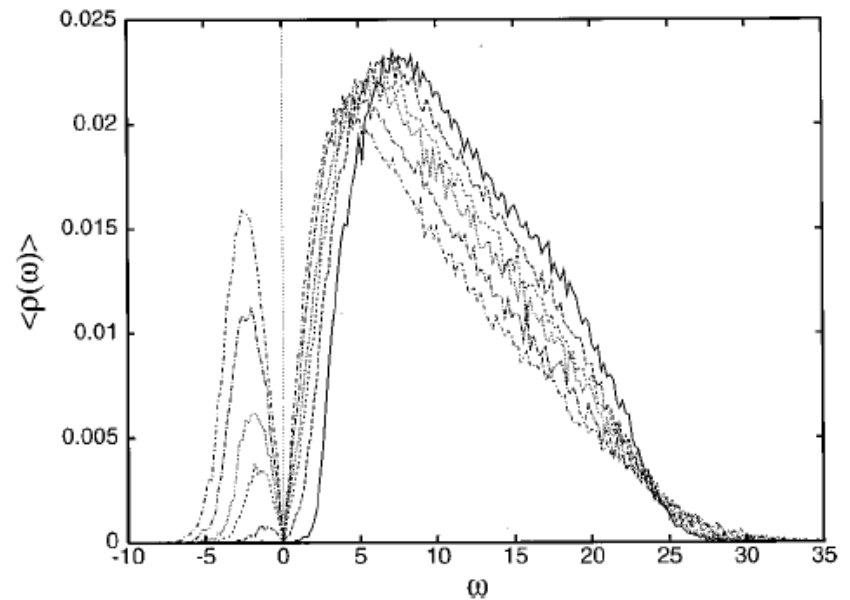


FIG. 1. Pure translation densities of states vs frequency (ps^{-1}) at $T = 298$ K (most Im- ω modes), 244, 193, 165, 135 K and $T_G = 100$ K (no Im- ω modes).

(расчет в гармоническом приближении)

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 136, 144504 (2012)

Localization transition of instantaneous normal modes and liquid diffusion

Vasile Iulian Clapa, Tsampikos Kottos, and Francis W. Starr

144504-3 Clapa, Kottos, and Starr

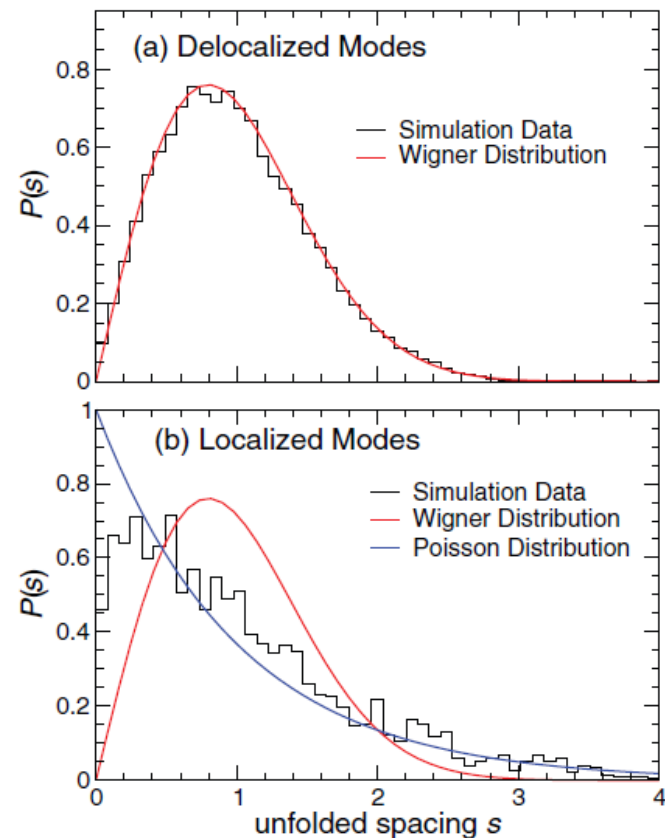
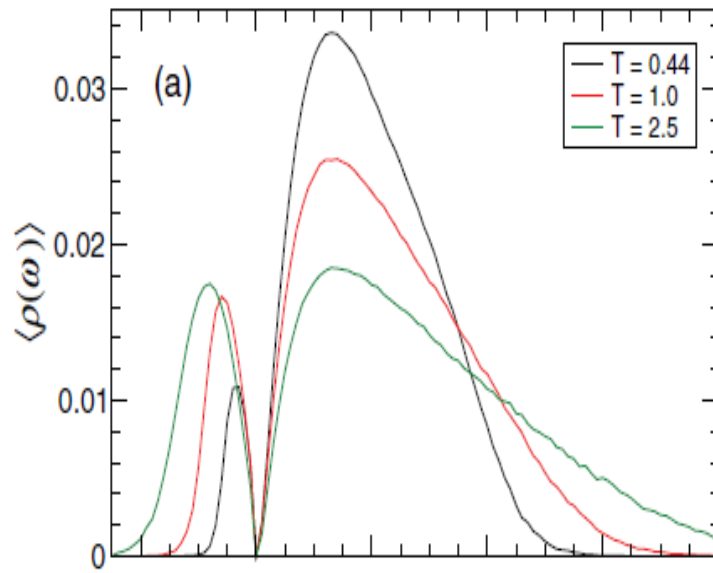


FIG. 5. The distribution $P(s)$ of unfolded frequency spacings s limited to a frequency range where we see either (a) delocalized or (b) localized behavior, demonstrating the expected transition from the Poisson to Wigner behavior. The data shown are for $T = 0.44$.

Квазифононы в стеклах- (расчет в гармоническом приближении)

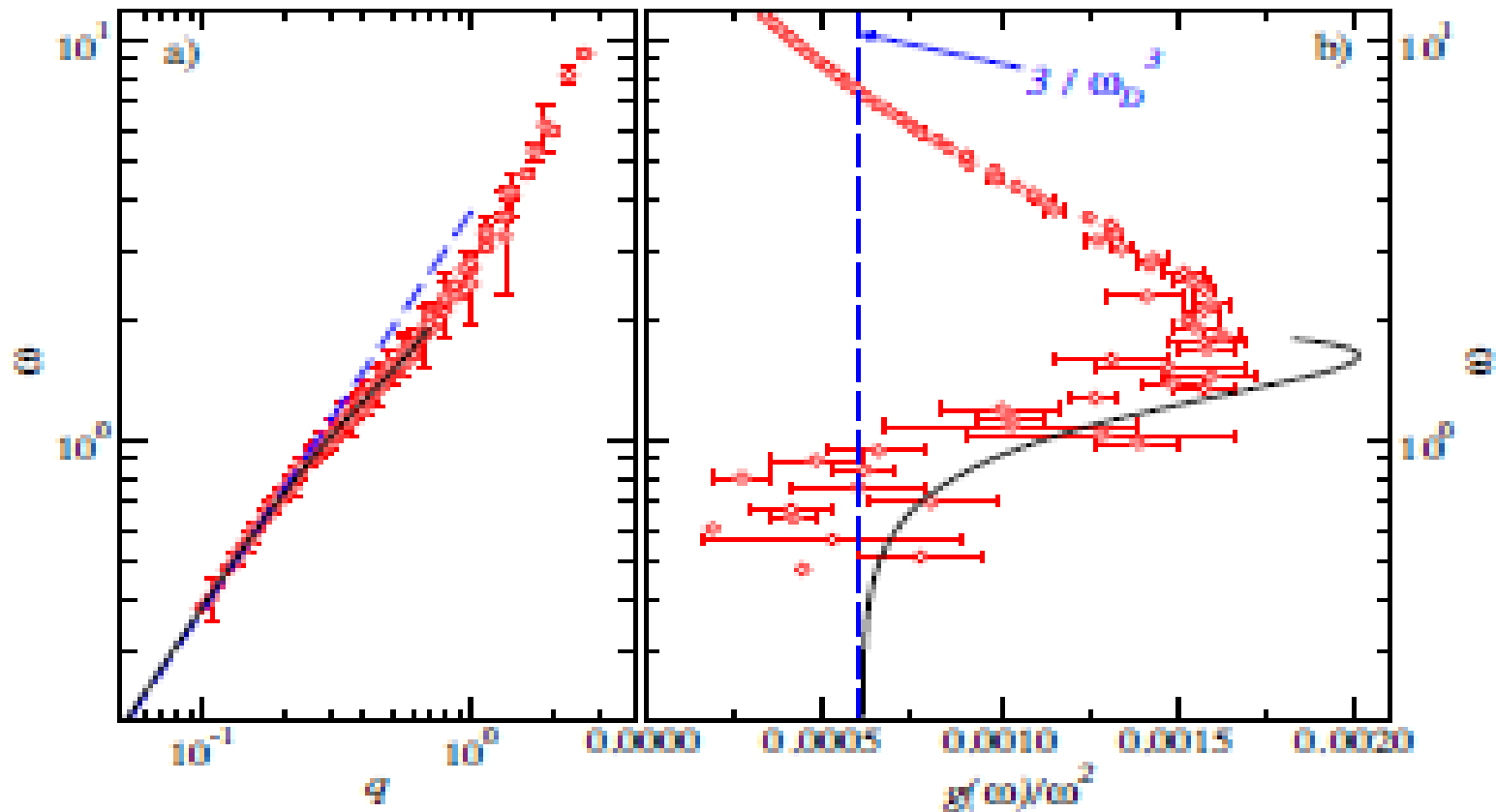
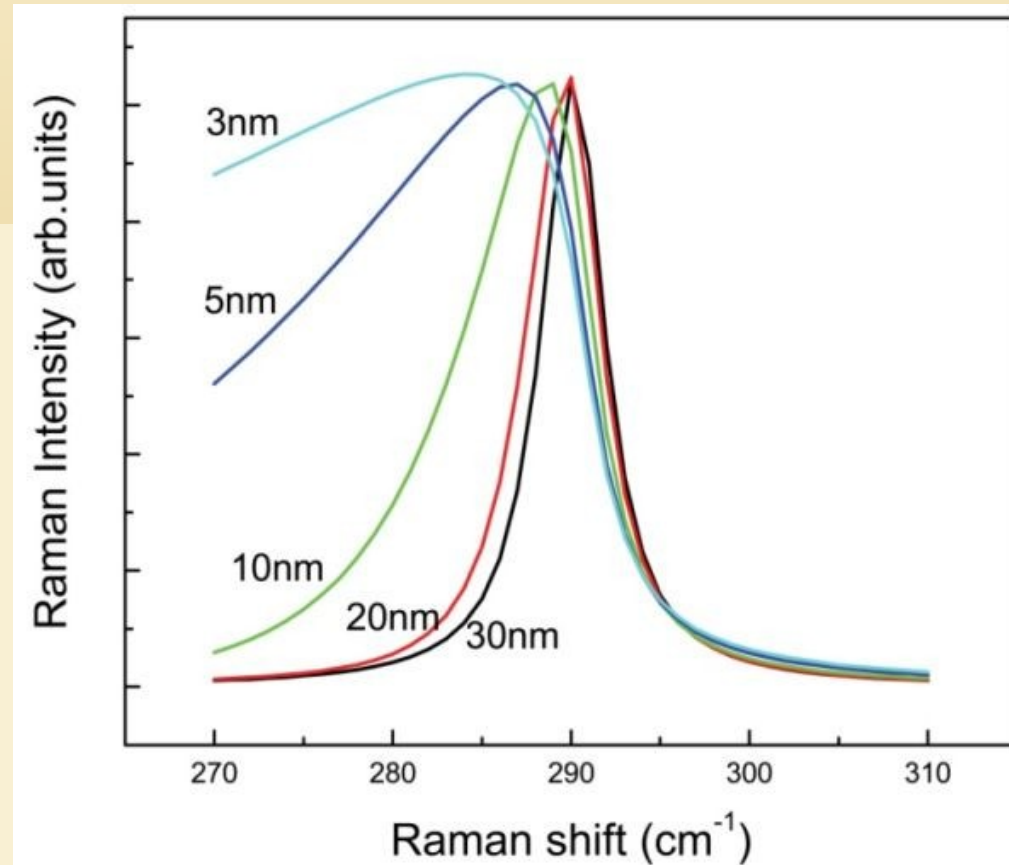
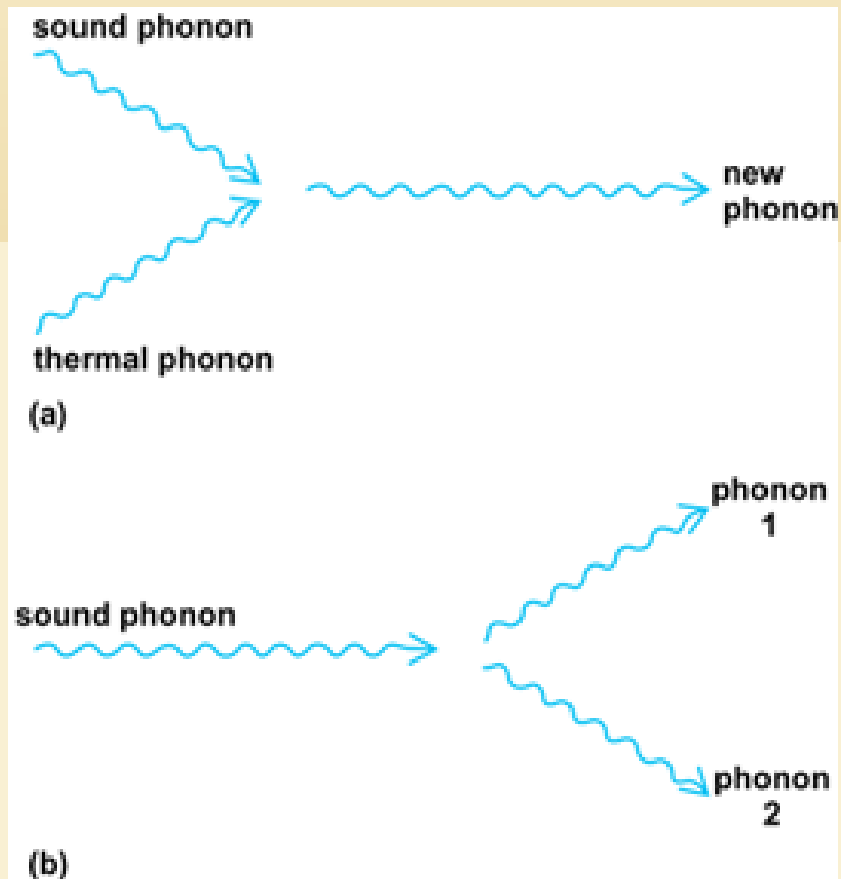


Fig. 4. Results of a normal-modes analysis of a LJ glass in its inherent structures. (A) q -dependence of the lowest frequency transverse eigenvalues of the studied LJ glass (circles) together with the function used to empirically describe it (full line). The initial slope of the curve corresponds to the $q \rightarrow 0$

Миф о затухании собственных возбуждений.



Квазифононы в жидкостях - (расчет без гармонического приближения)

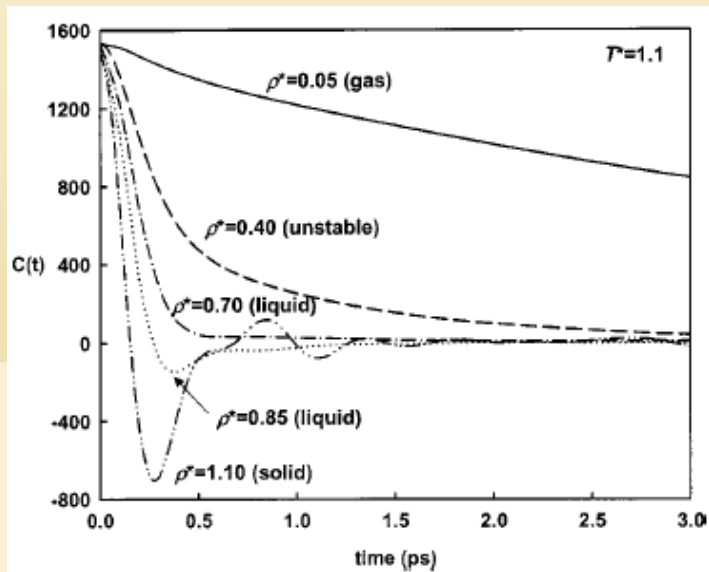
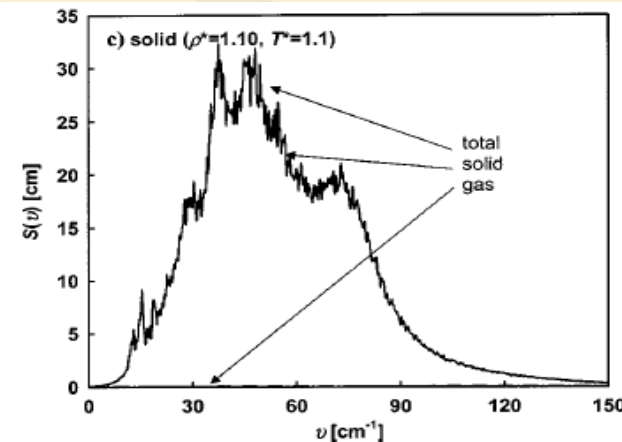
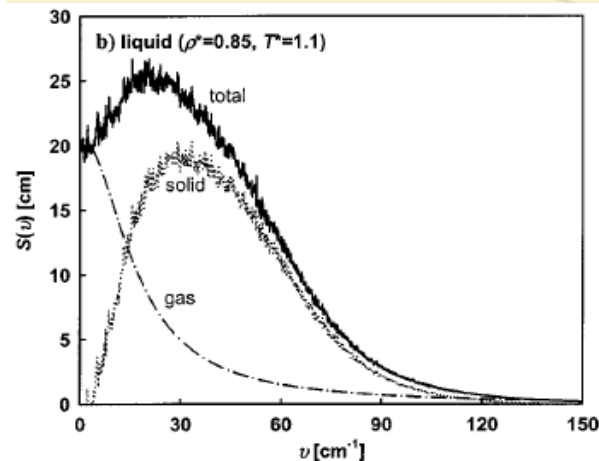
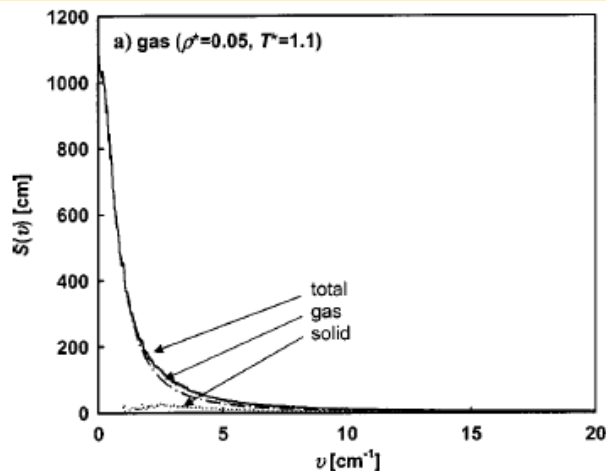
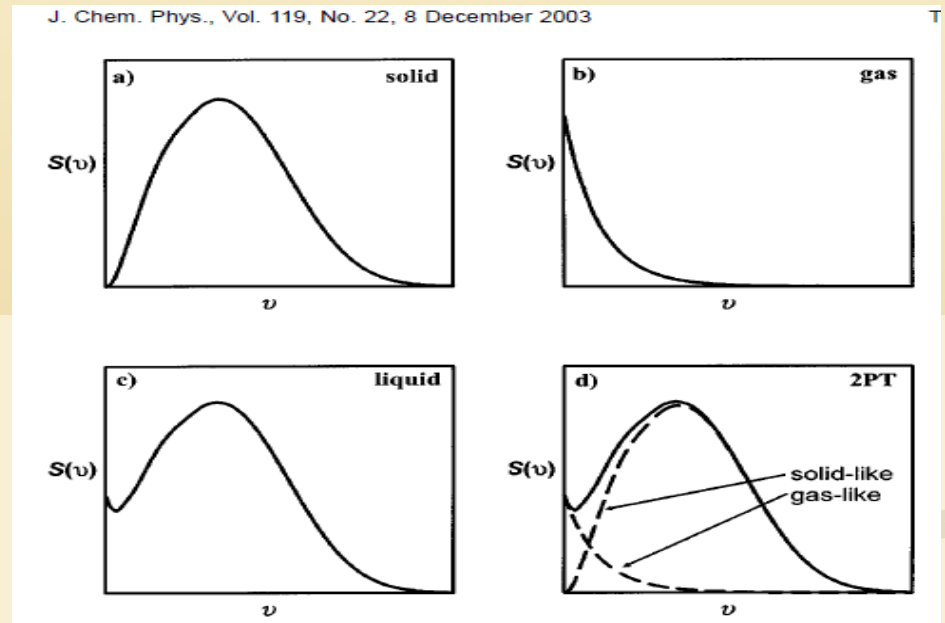
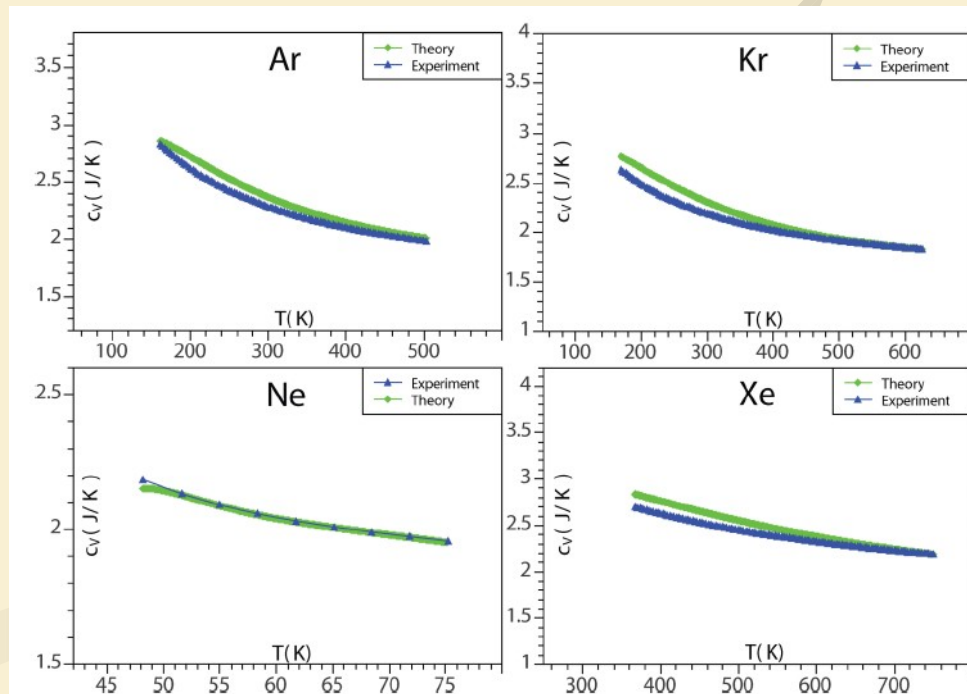
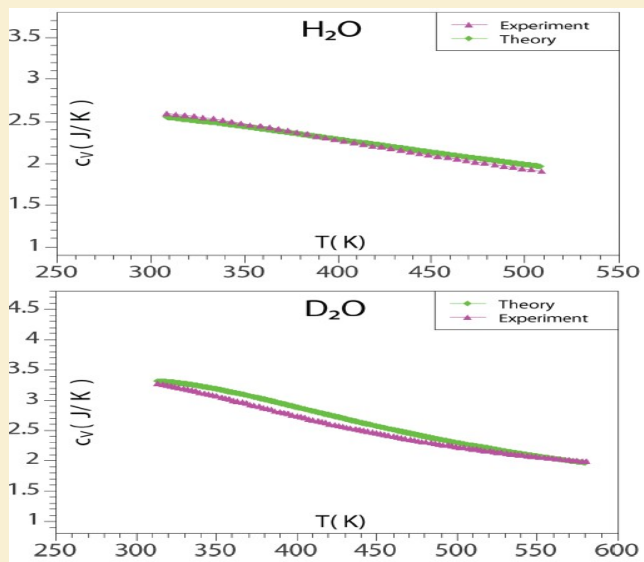
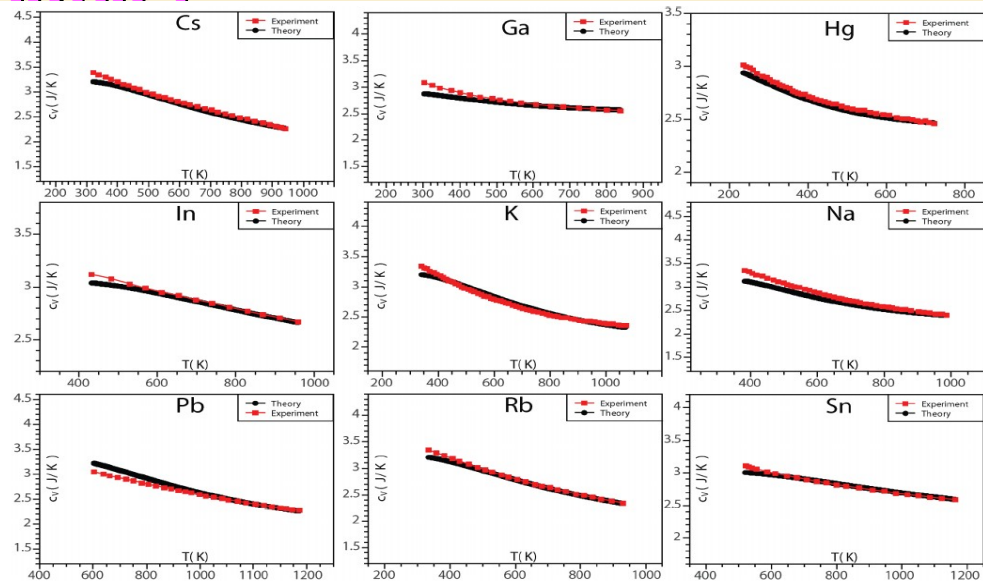
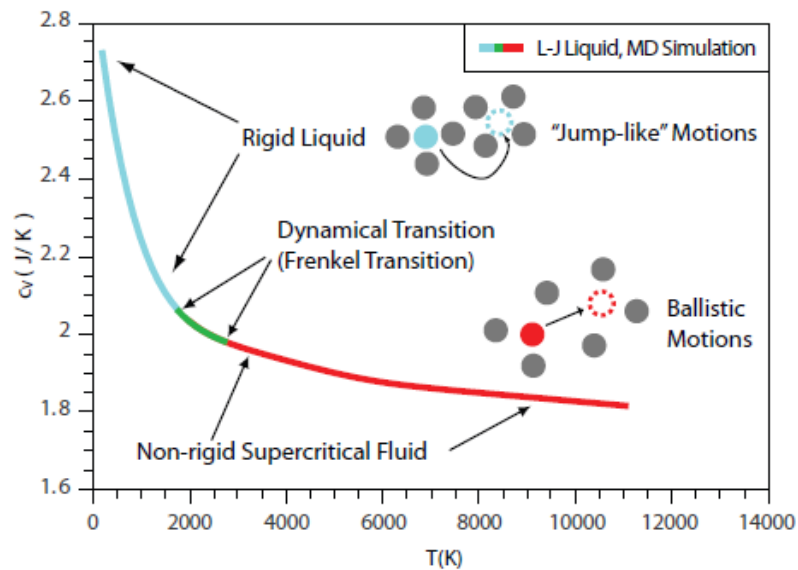


FIG. 5. The velocity autocorrelation (VAC) function for Lennard-Jones systems at $T^*=1.1$ and different densities: $\rho^*=0.05$ gas, $\rho^*=0.40$ unstable fluid, $\rho^*=0.70$ liquid, $\rho^*=0.85$ liquid, and $\rho^*=1.10$ crystal.

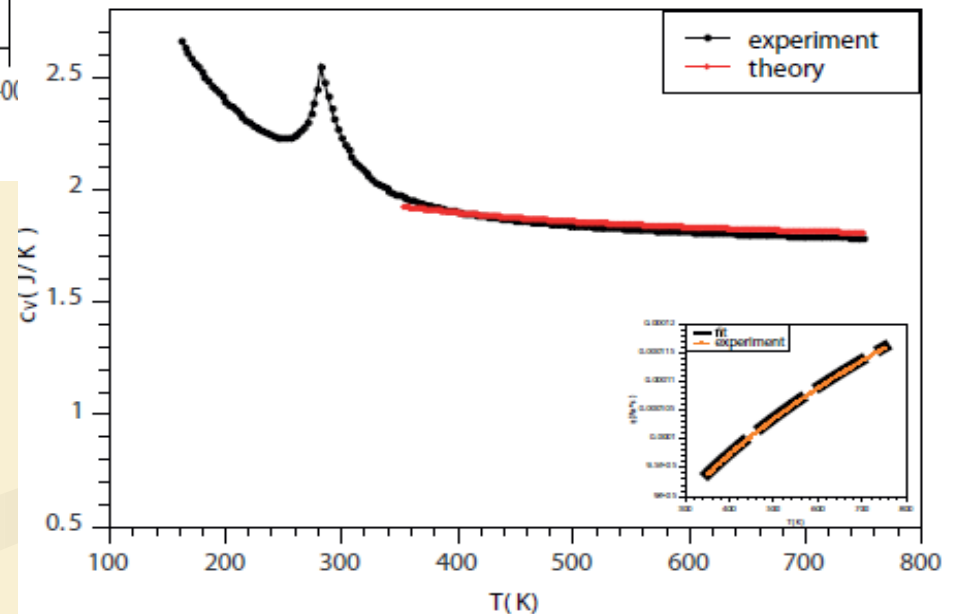
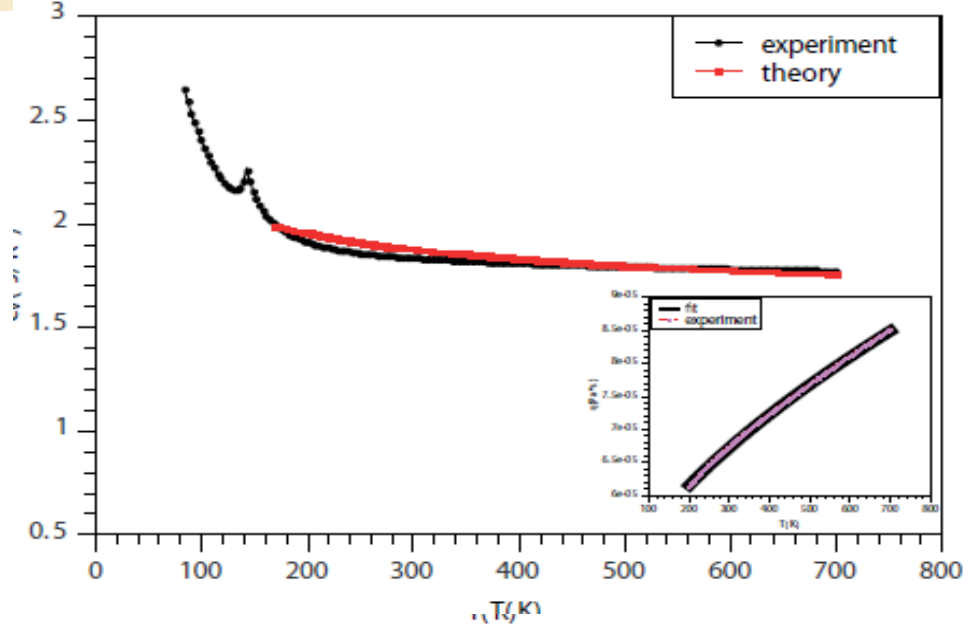
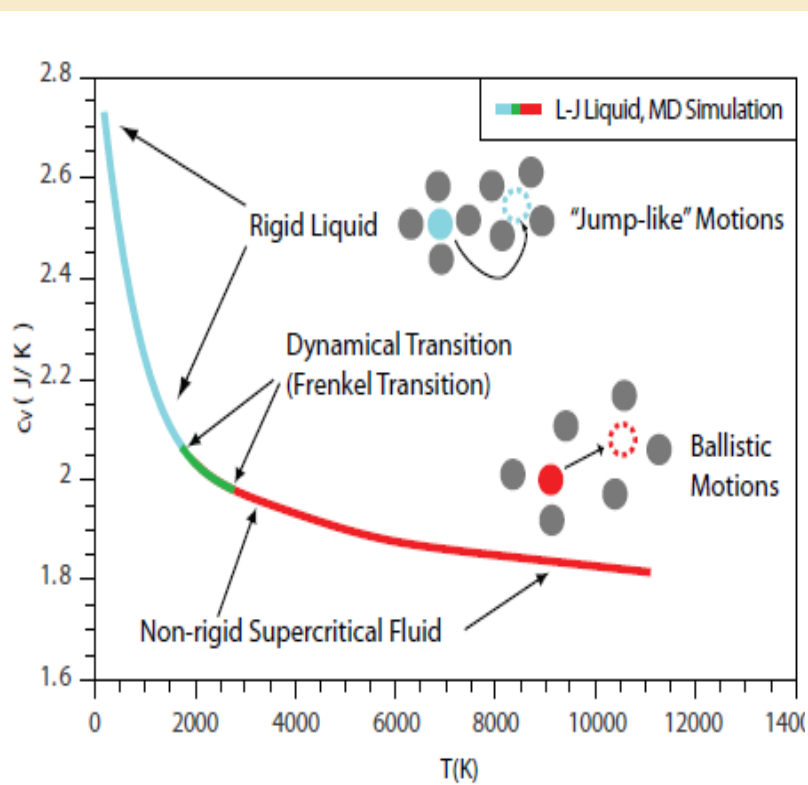


Тепловые свойства жидкостей (дебаевская модель)

$$\frac{E}{N} = k_B T \left[3 - \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^3 \right].$$

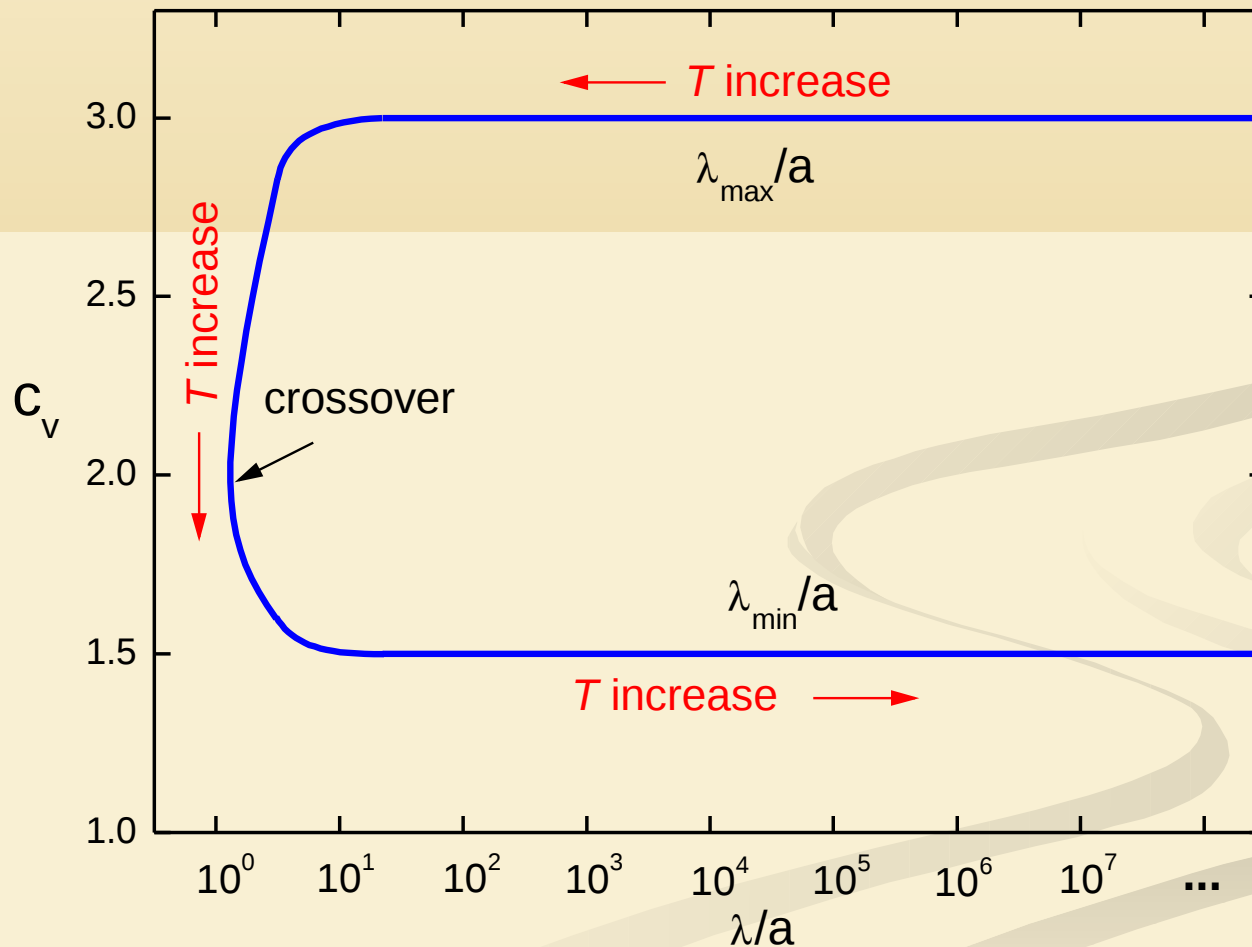


Тепловые свойства плотного газа (дебаевская модель!!!)



$$E = \frac{3}{2}k_B T + \left(1 + \frac{1}{2}\alpha T\right) \frac{1}{2}k_B T \frac{a^3}{\lambda^3}$$

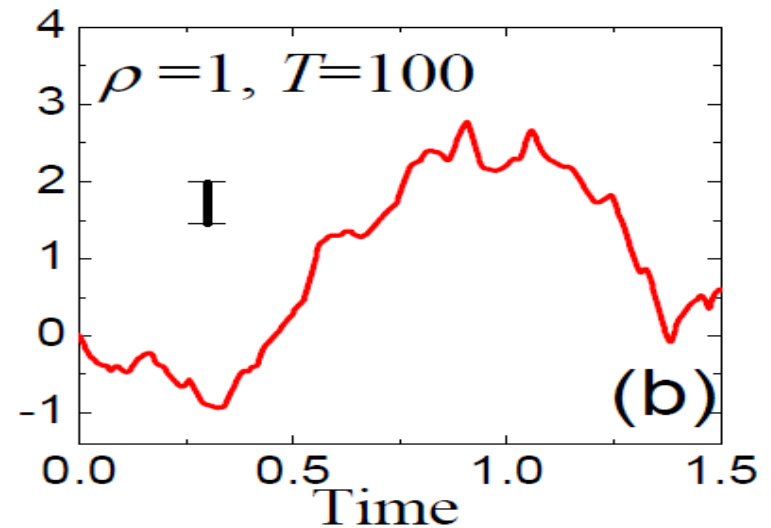
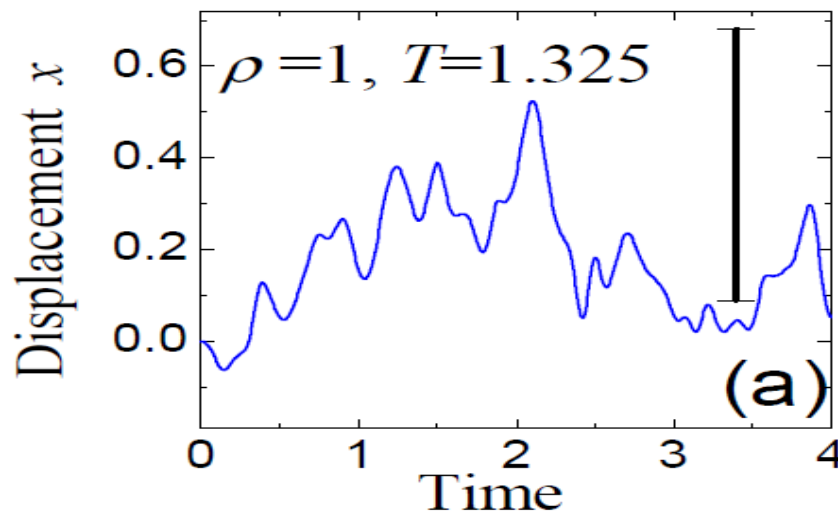
Тепловые свойства жидкостей и газов в закритической области (дебаевская модель)



динамический кроссовер твердоподобная жидкость- плотный газ

- $2\pi/\tau < \omega < 2\pi/\tau_0$ – исчезновение
сдвиговой жесткости при $\tau \approx \tau_0$.
- $C_V \approx 2k_B$

$$\frac{E}{N} = k_B T \left[3 - \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^3 \right].$$



Анализ динамики частиц

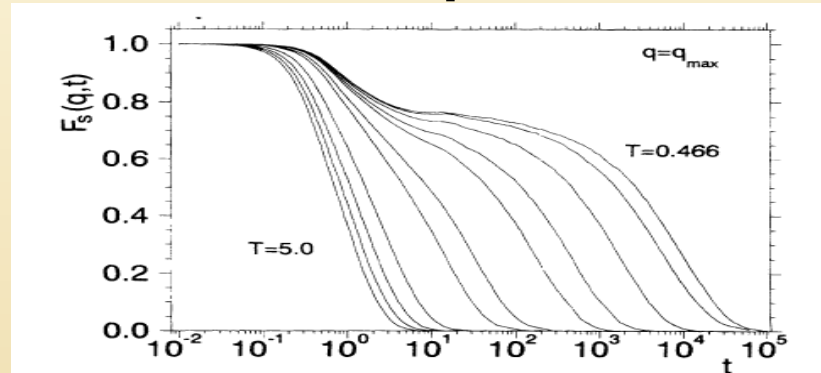
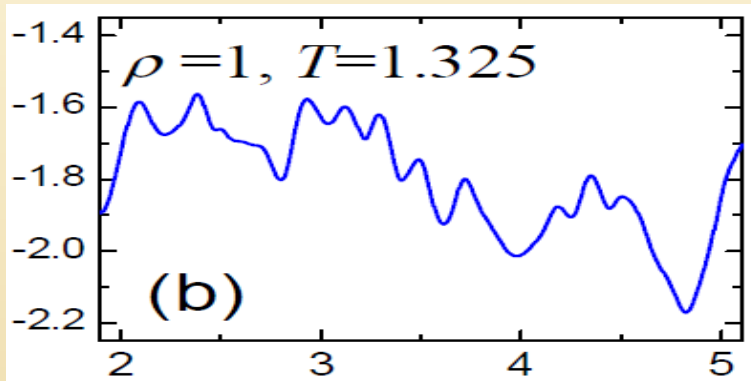


FIG. 1. Self-intermediate-scattering function $F_s(q, t)$ for A particles vs t . $a = 7.251\sigma$, the location of the first peak in

1) Self-intermediate scattering function

$$F_s(q, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j=1}^N \exp[iq(\vec{r}_j(t) - \vec{r}_j(0))] \right\rangle$$

2) VAF

$$C(t) = \langle v(0)v(t) \rangle$$

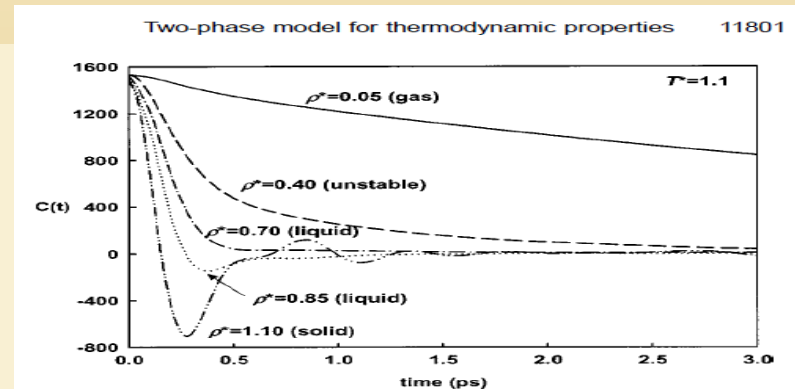
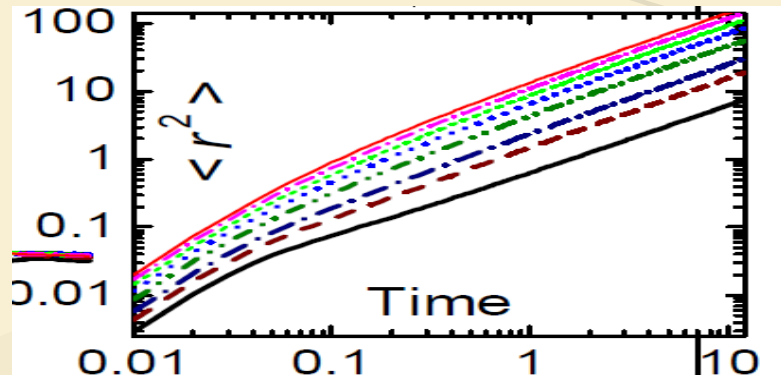
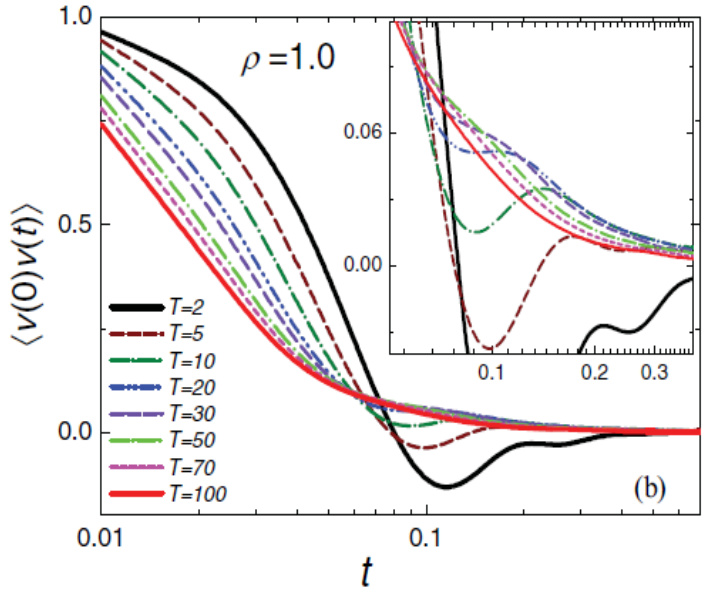


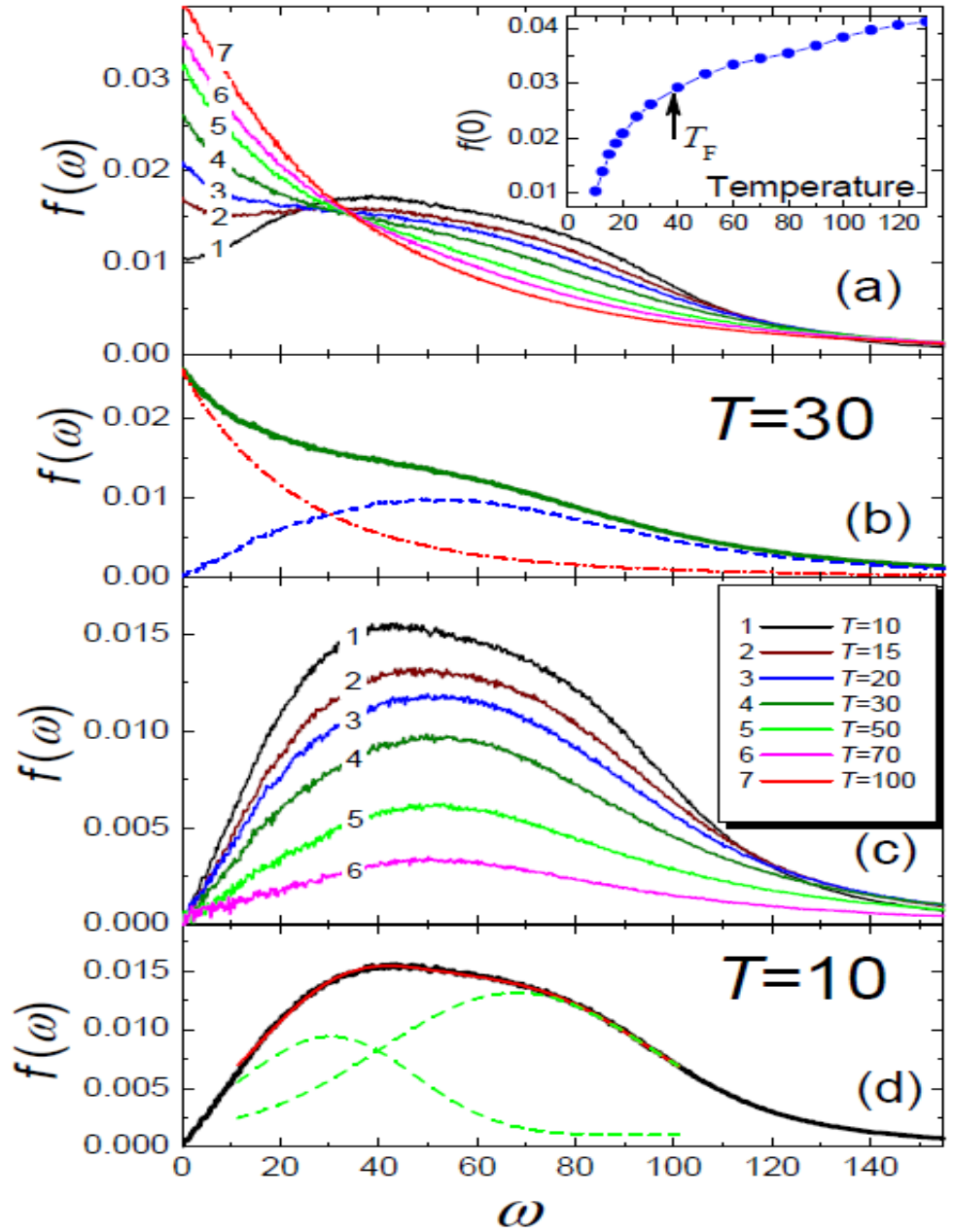
FIG. 5. The velocity autocorrelation (VAC) function for Lennard-Jones systems at $T^* = 1.1$ and different densities: $\rho^* = 0.05$ gas, $\rho^* = 0.40$ unstable fluid, $\rho^* = 0.70$ liquid, $\rho^* = 0.85$ liquid, and $\rho^* = 1.10$ crystal.

3) mean-square displacement $\langle r^2(t) \rangle$

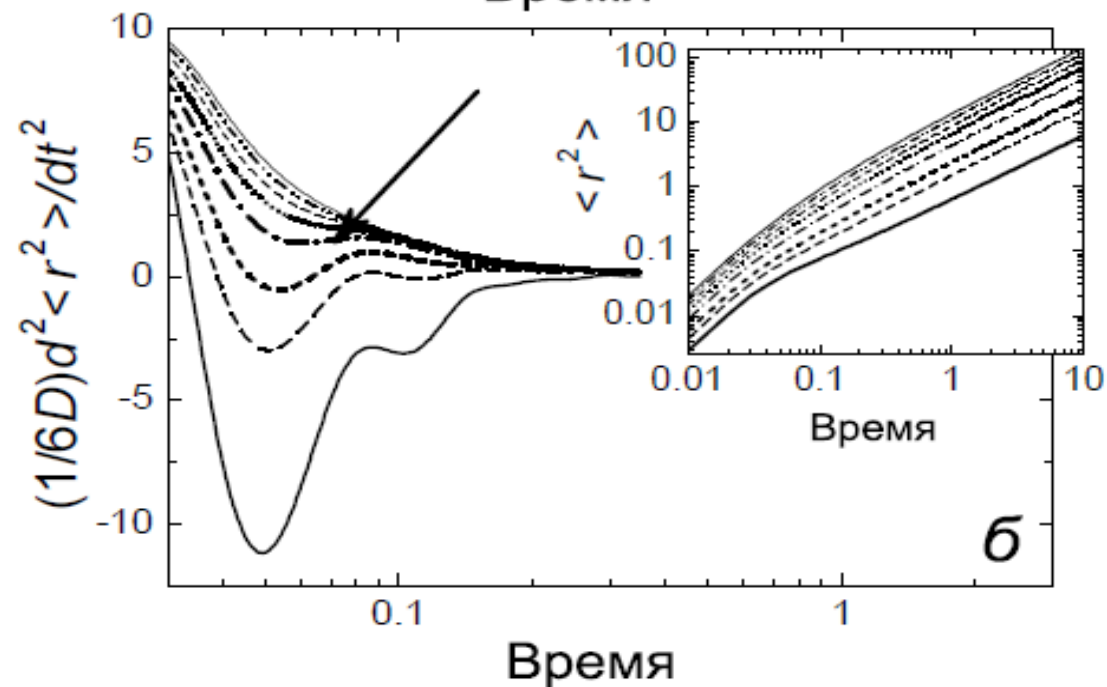
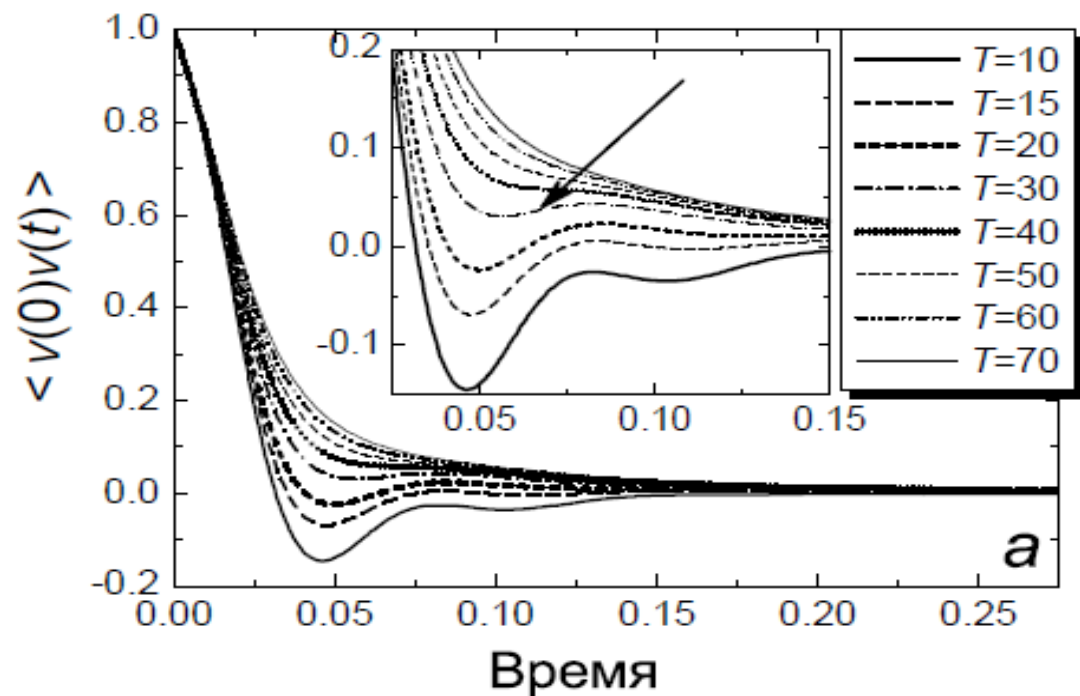




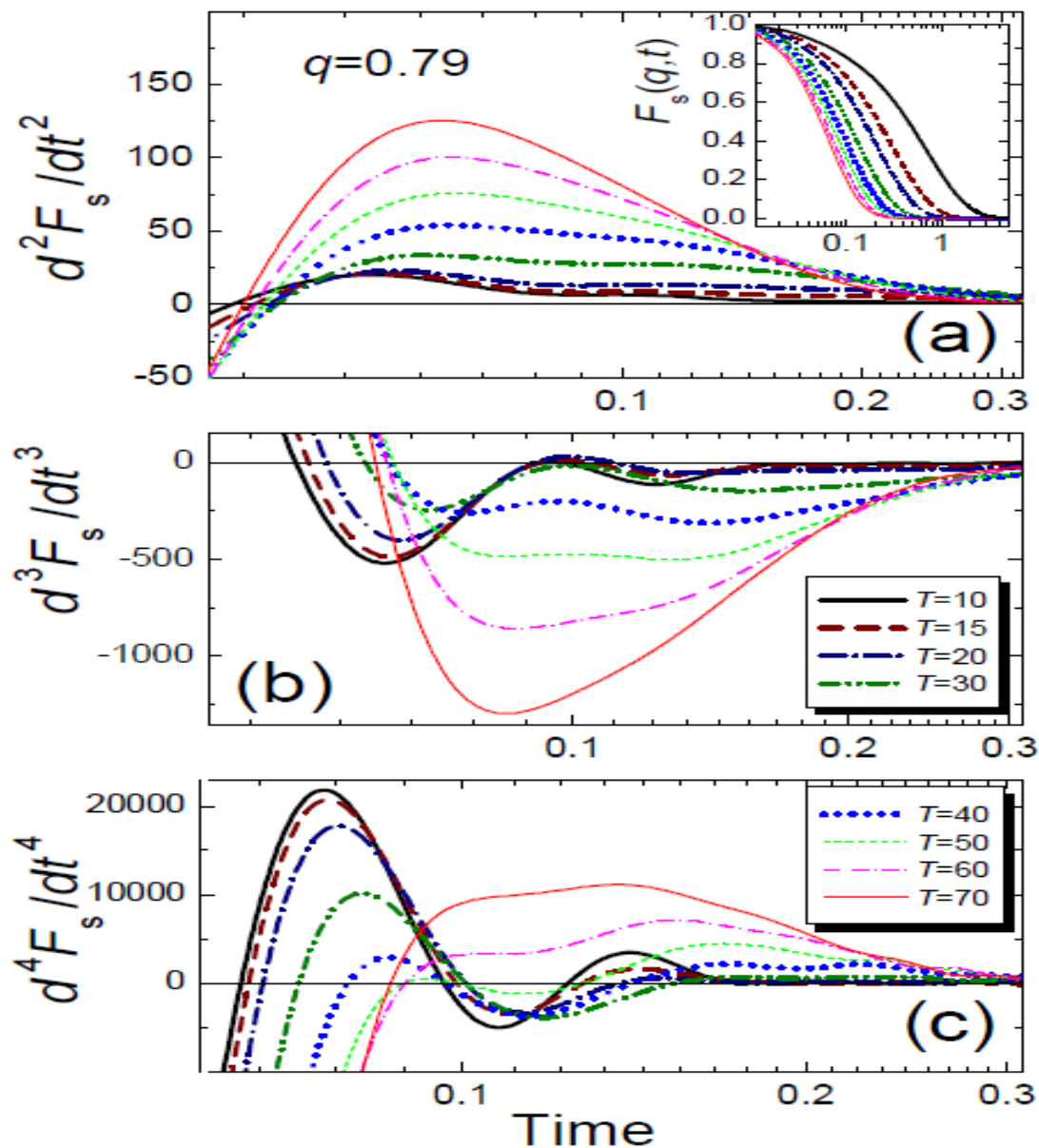
**Плотность
колебательн
ых состояний
-
исчезновение
поперечных**

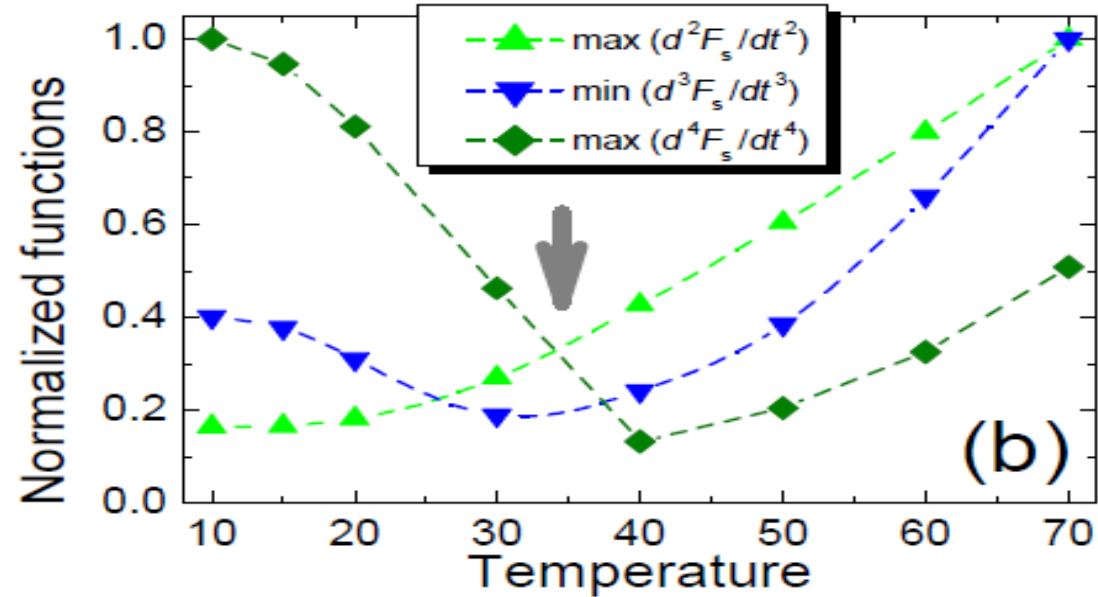
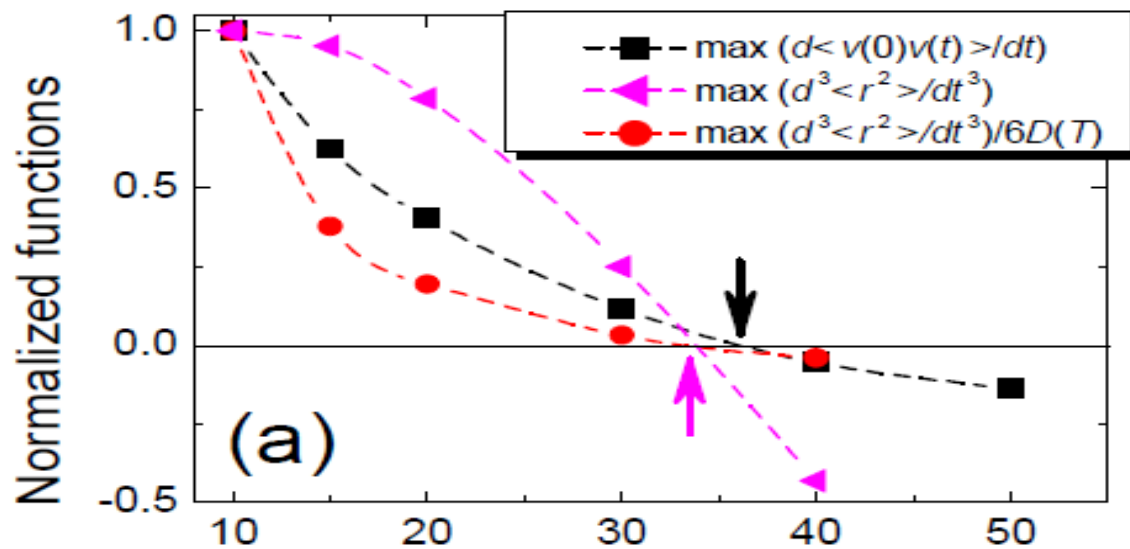


Изменение типа динамики по VAF и среднеквадра- тичному смещению

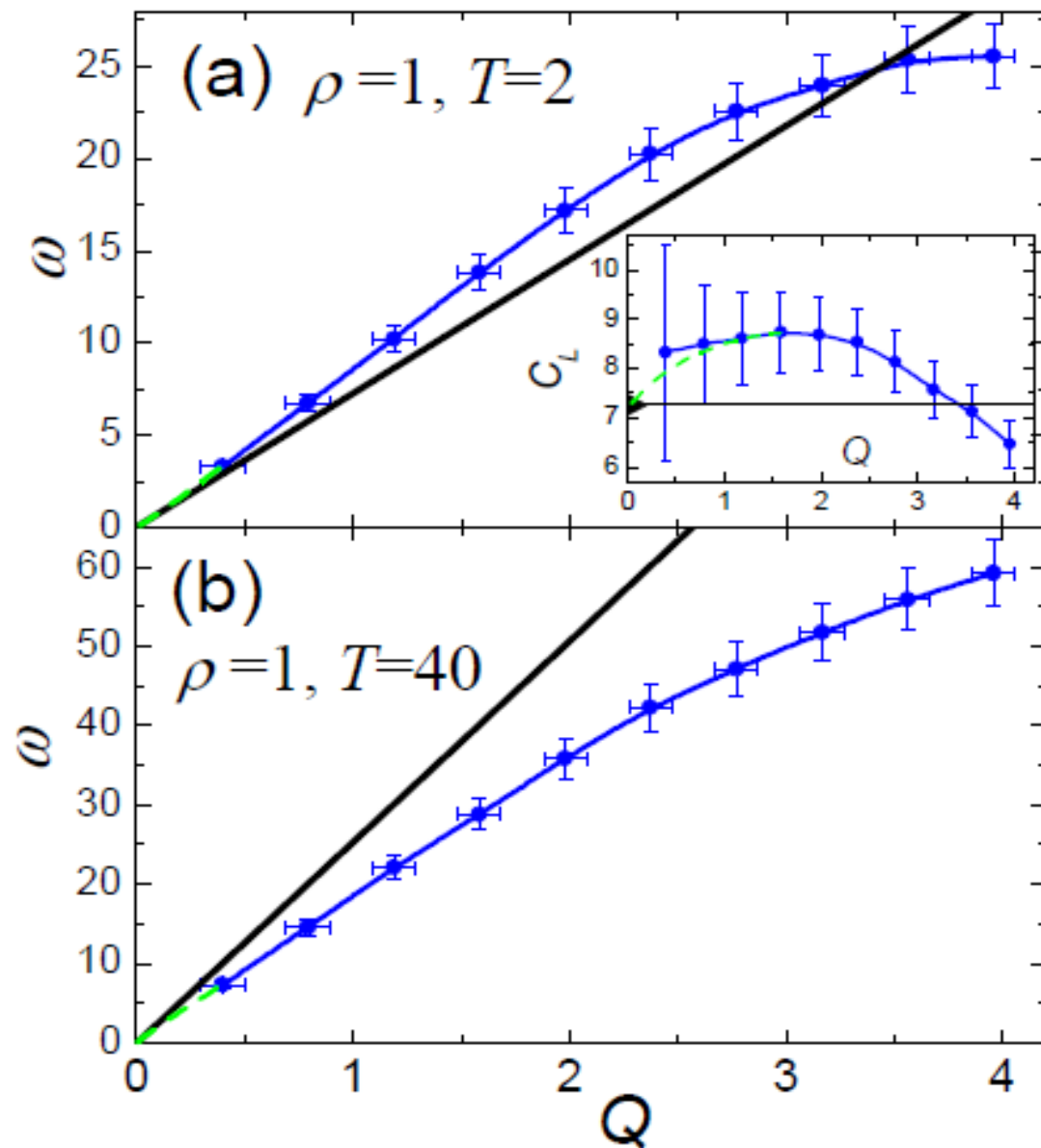


Изменение
характера
Self-
intermediate
scattering
function
(автокоррел
яционные
функции
рассеяния)

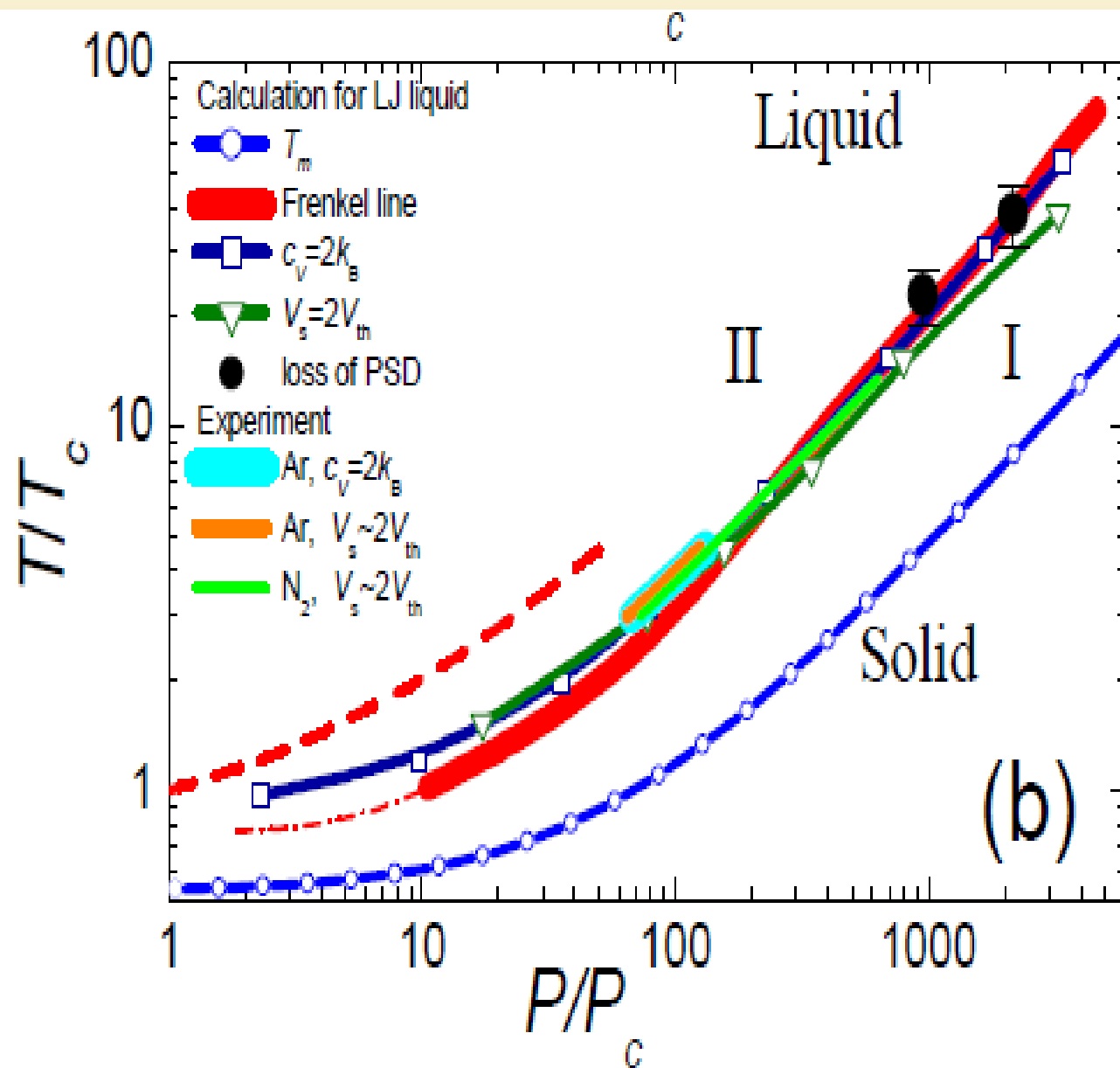




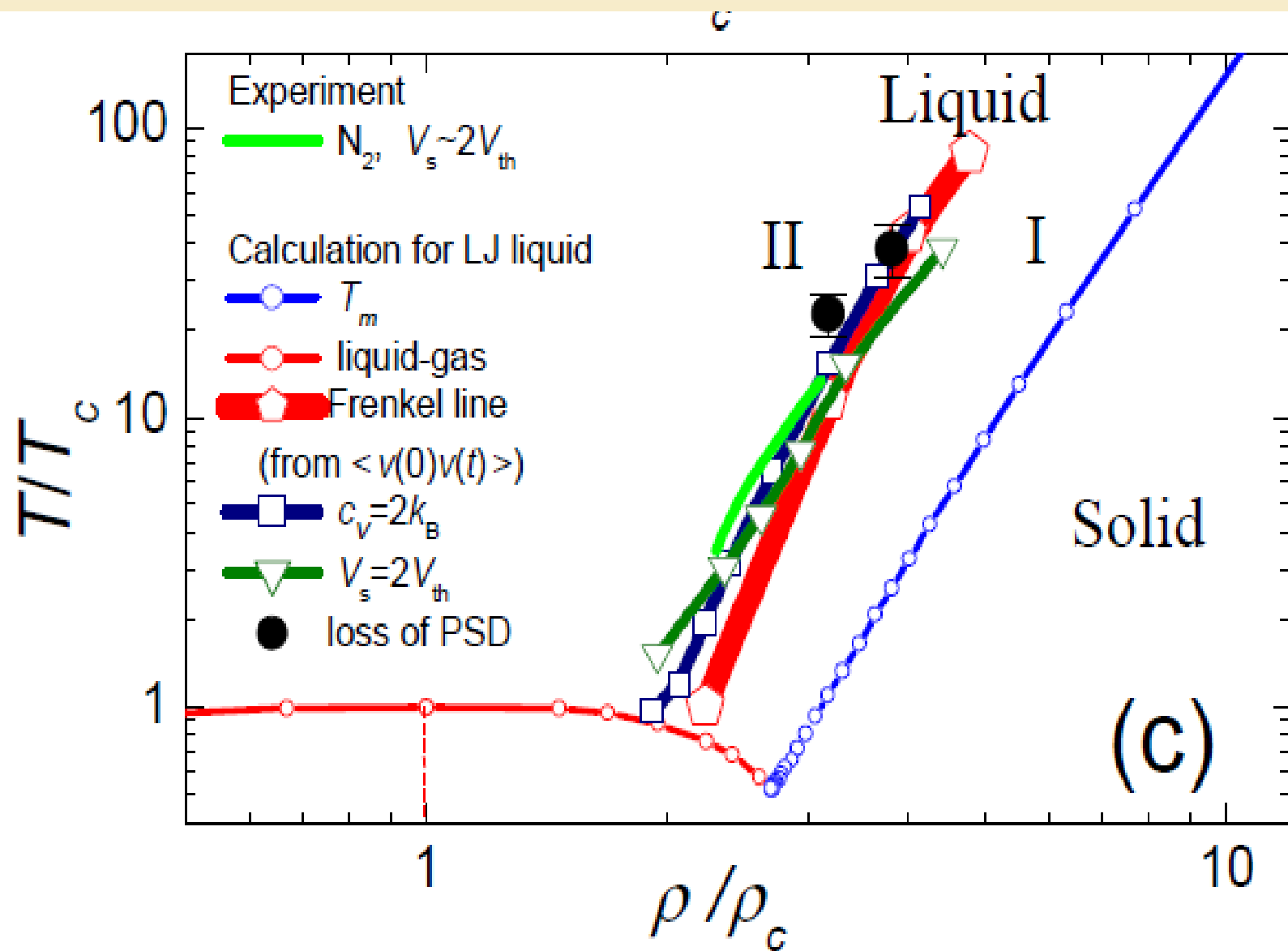
Положительная дисперсия продольных возбуждений



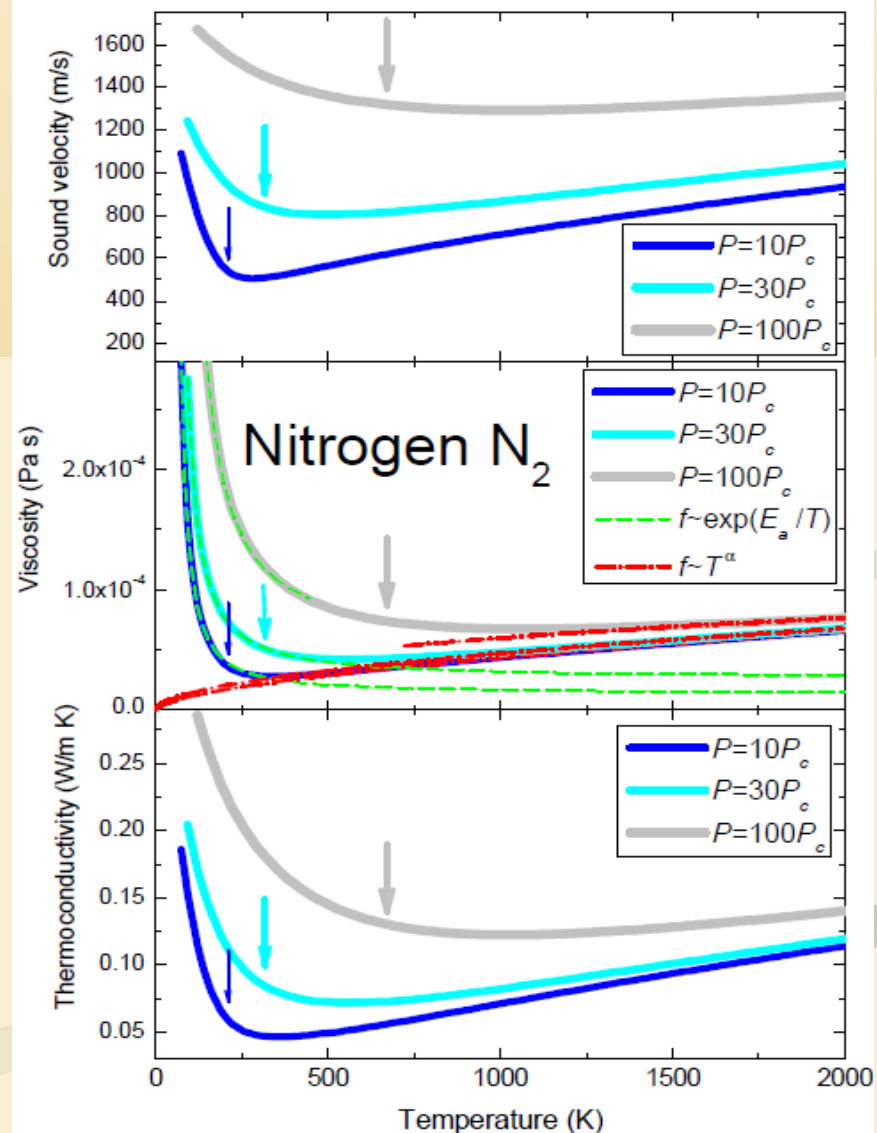
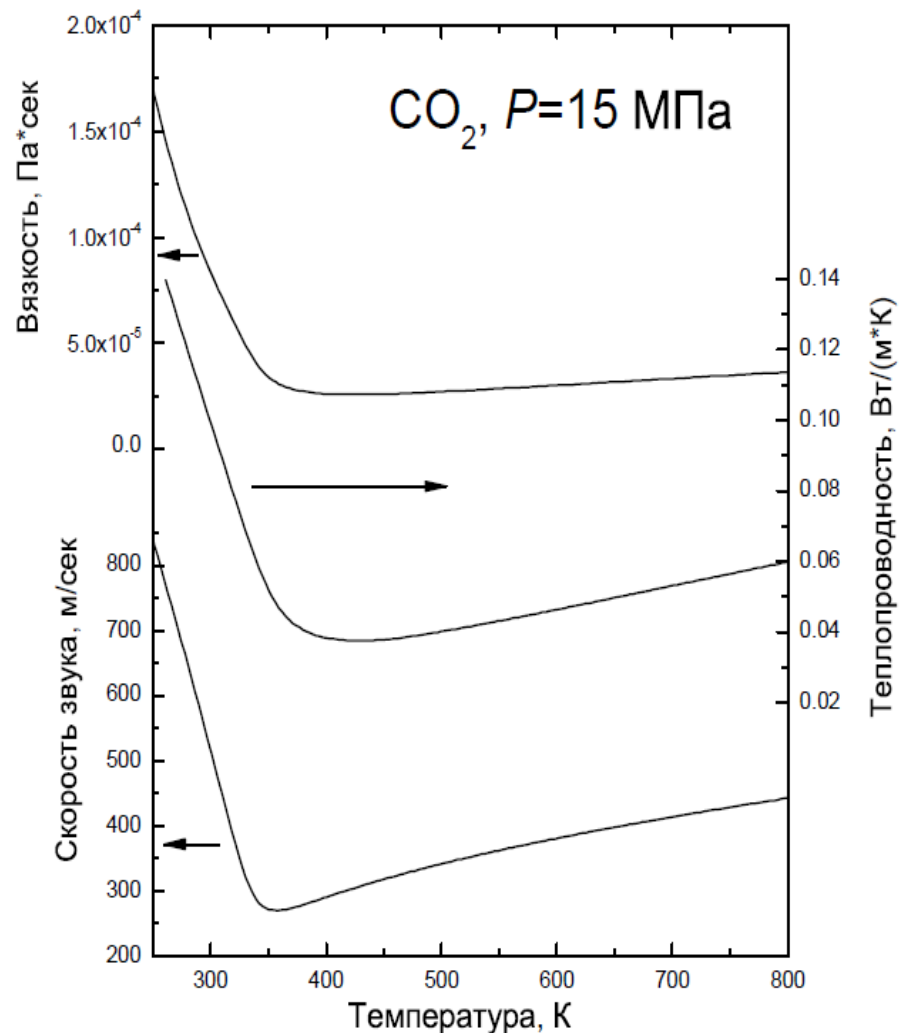
Линия
 перехода
 жидкость -
 плотный га



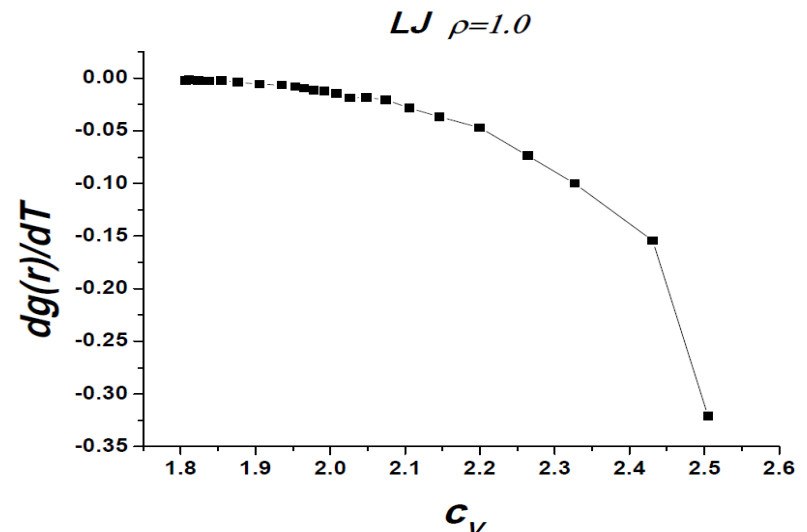
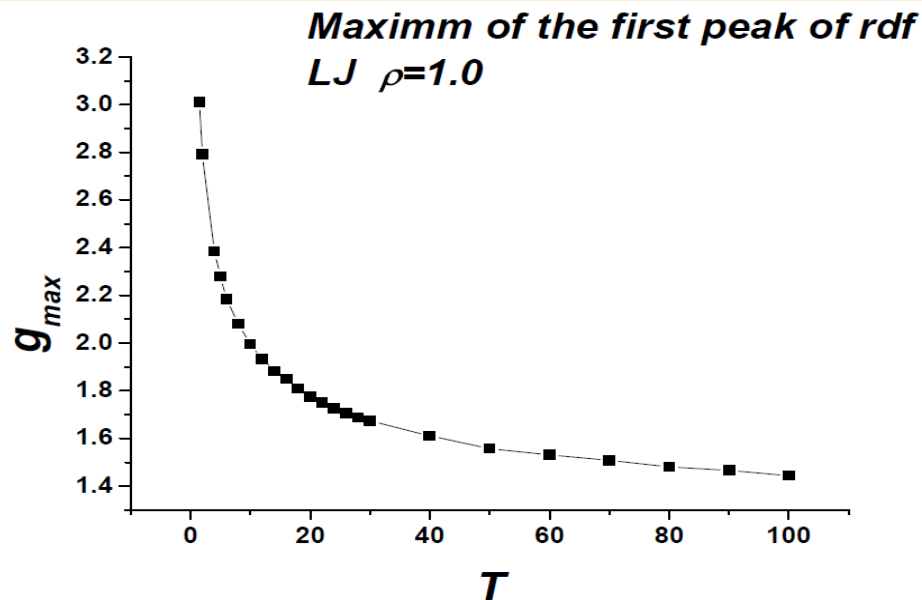
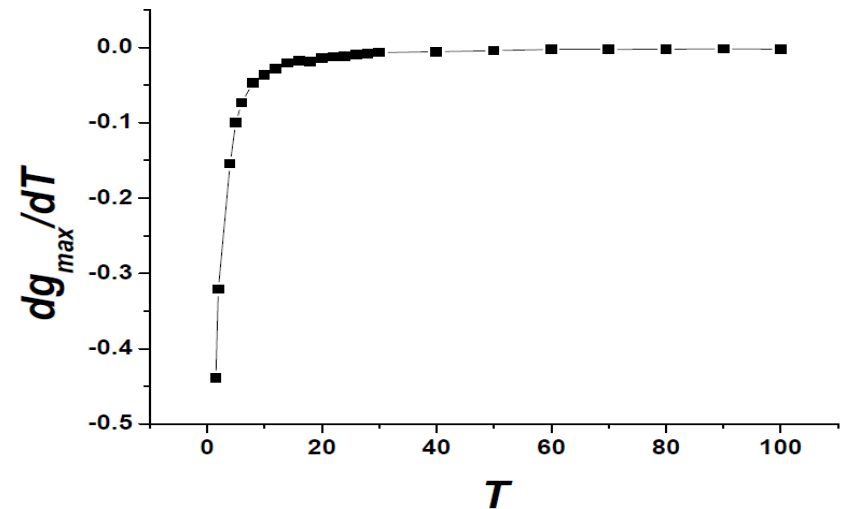
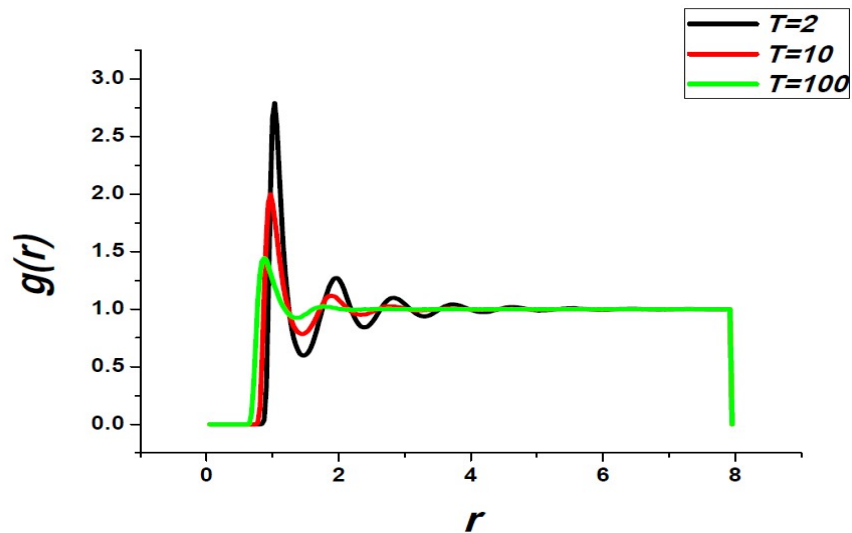
Линия перехода жидкость - плотный газ



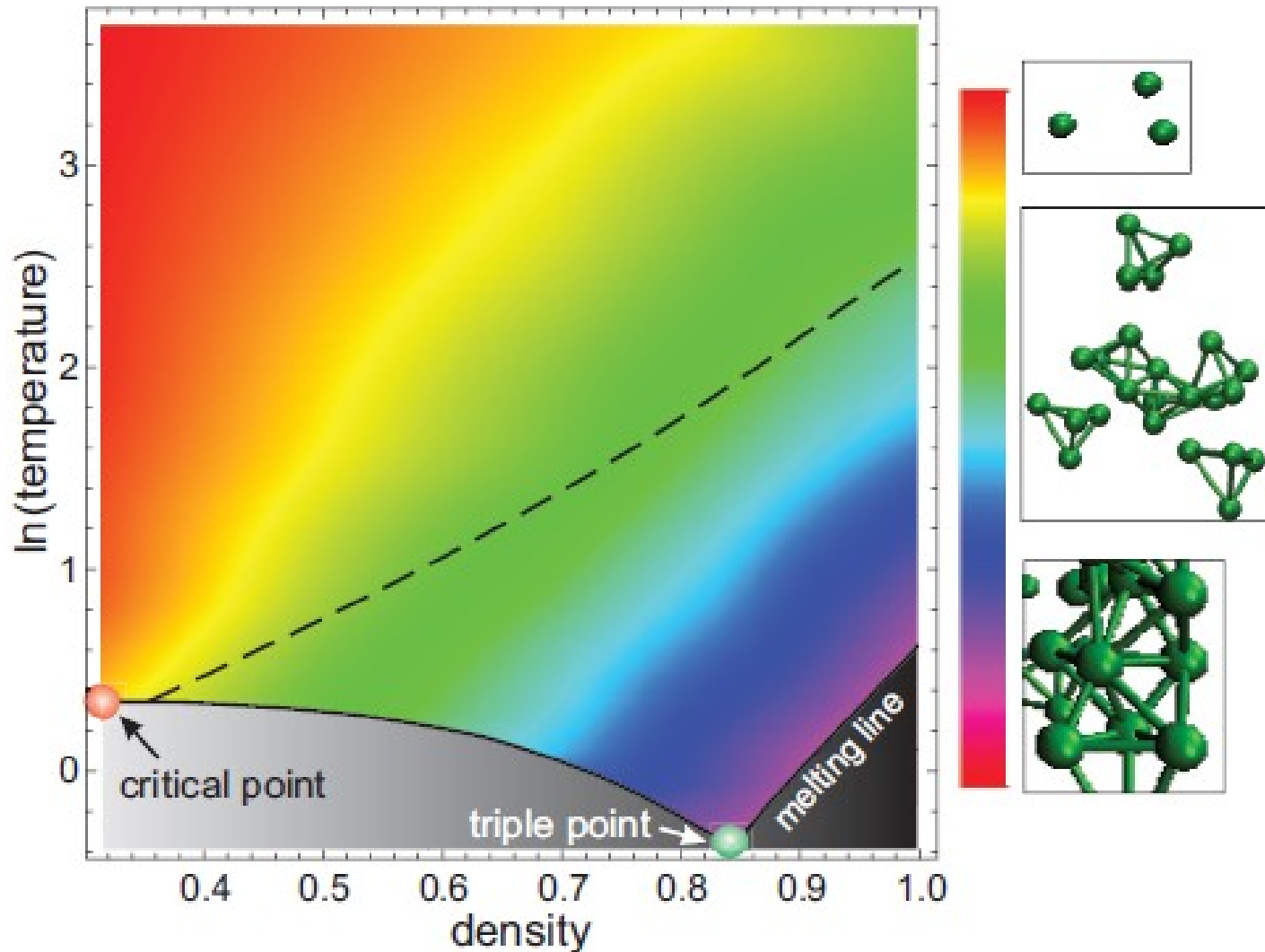
Изменение свойств при кроссовере жидкость-плотный газ



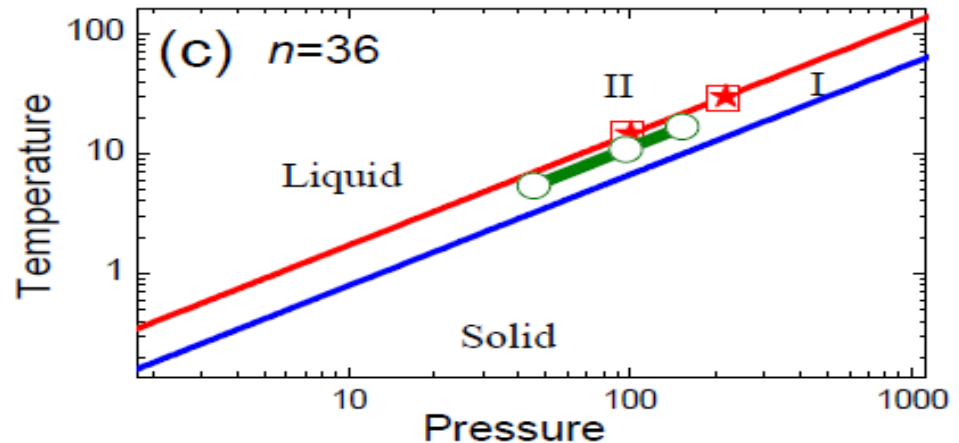
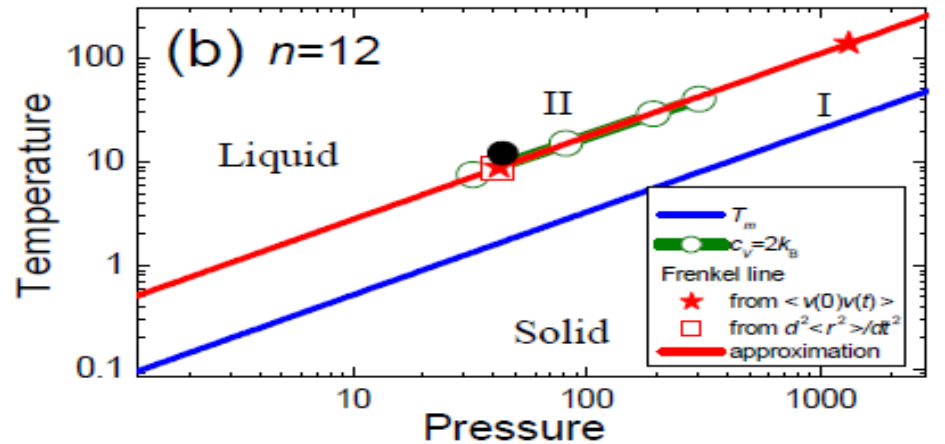
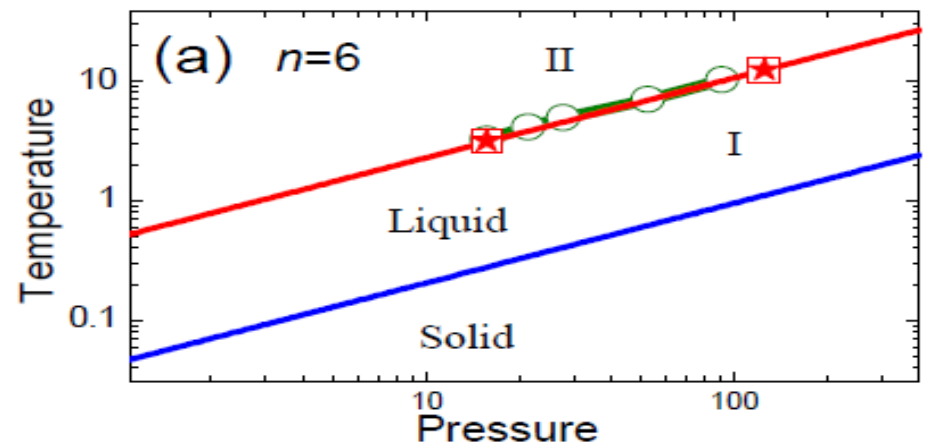
Изменение структуры при кроссовере жидкость-плотный газ



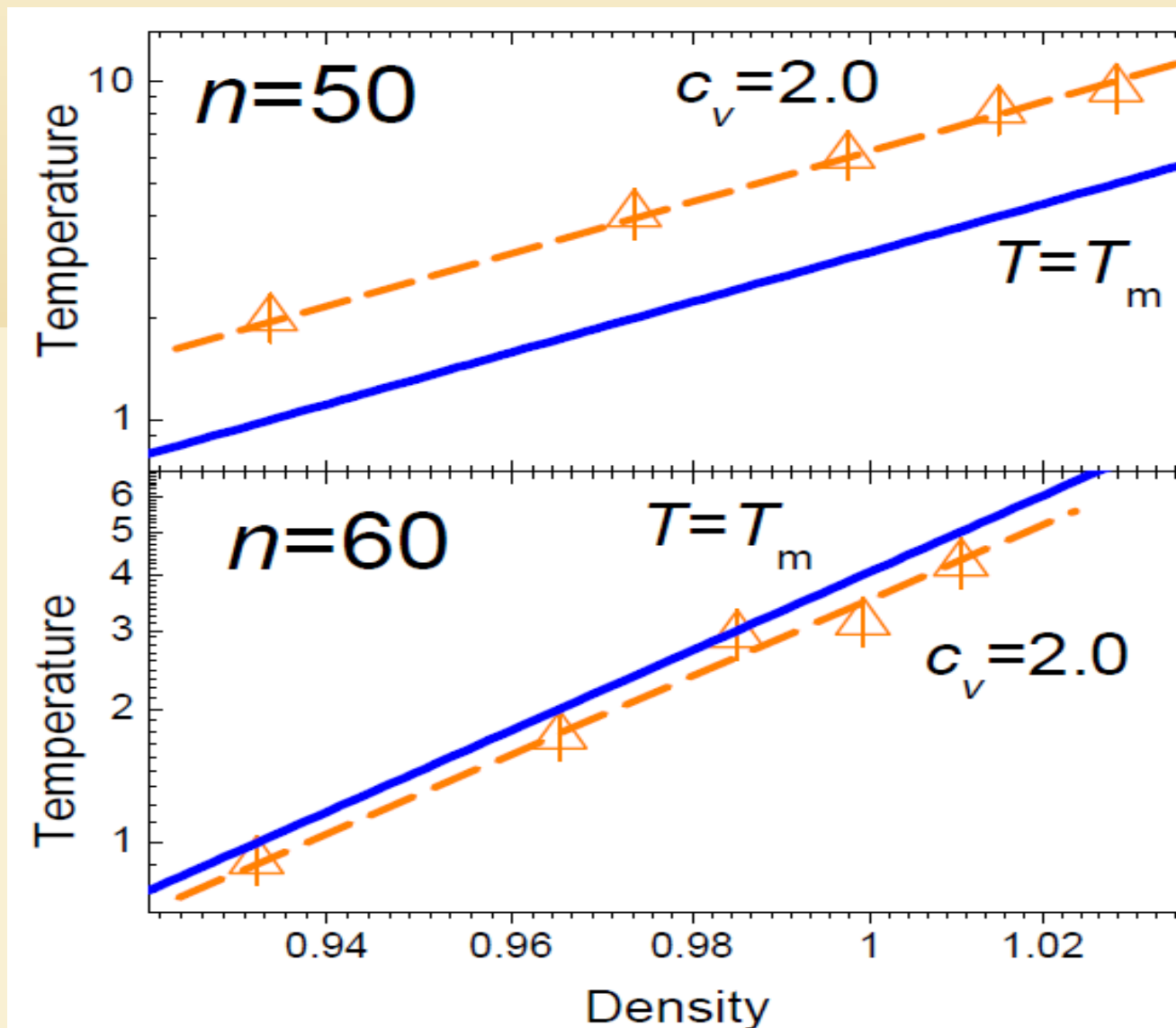
Линия перехода жидкость - плотный газ как линия перколяции тетраэдрических кластеров



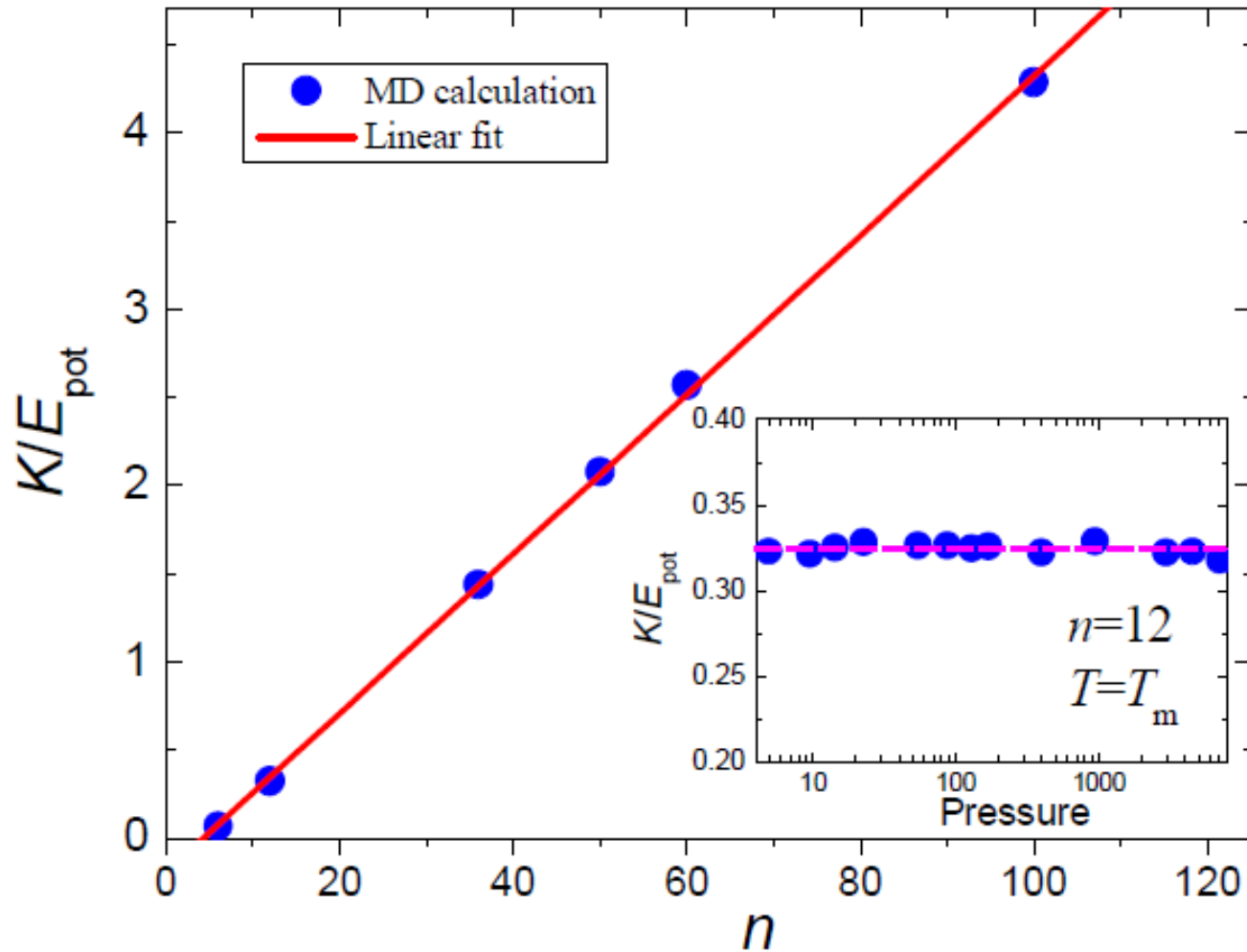
Переход твердоподобн ый флюид- газоподобный флюид для системы мягких сфер



Отсутствие твердоподобного флюида при больших степенях отталкивания



Отношение кинетической энергии к потенциальной на кривой плавления для разных степеней отталкивания



Мост между казигазовым и твердотельным описанием с помощью компьютера

$$n(k,t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j},$$

$$J^L(k,t) = \frac{m}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \frac{\mathbf{k}\mathbf{v}_j}{k} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j},$$

$$h(k,t) = \varepsilon(k,t) - \frac{\langle \varepsilon_k n_{-k} \rangle}{\langle n_k n_{-k} \rangle} n(k,t),$$

$$\varepsilon(k,t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \varepsilon_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j},$$

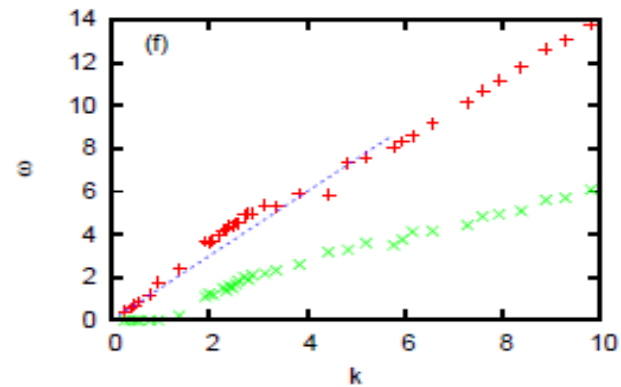
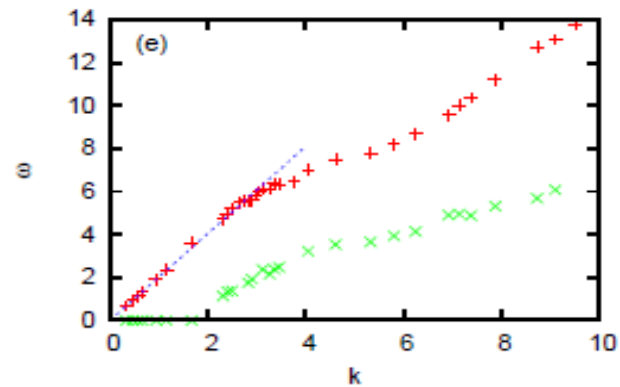
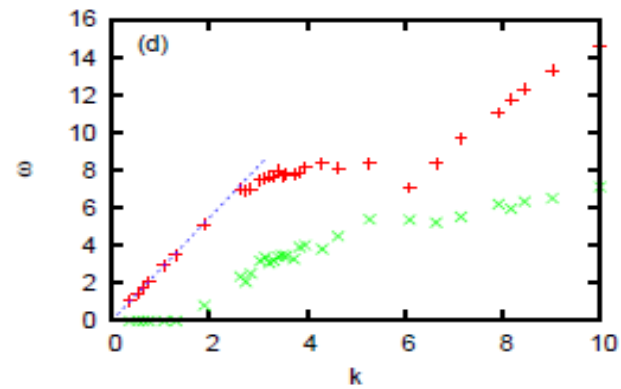
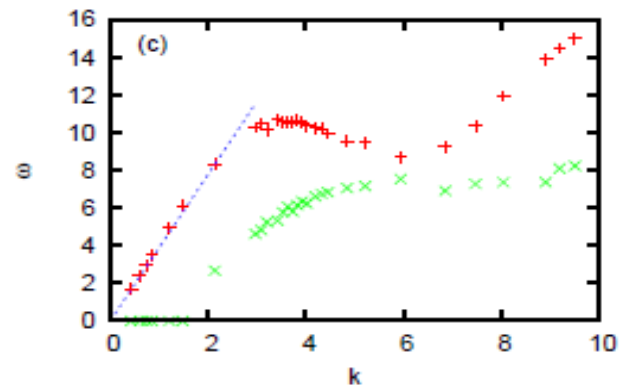
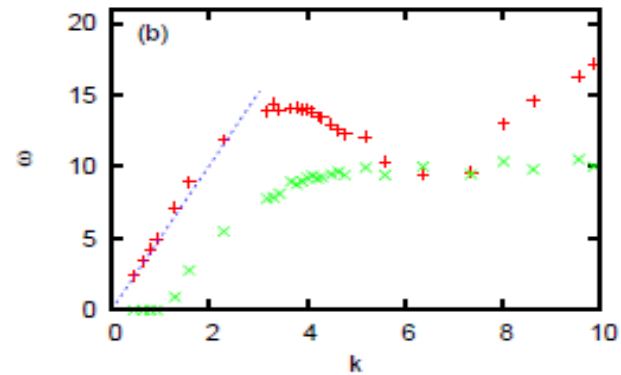
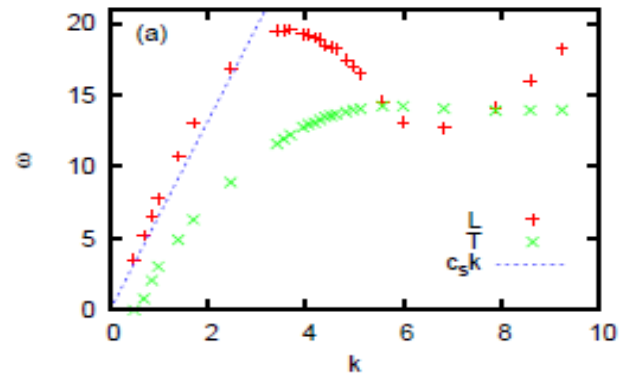
The main equations of the GCM approach for the case of pure systems can be found in Ref. 16. The general scheme of GCM analysis consists in the calculation of the generalized hydrodynamic matrix $\mathbf{T}(k)$ on a chosen basis set of dynamic variables and finding its eigenvalues and eigenvectors. The pairs of complex-conjugated eigenvalues correspond to propagating modes, while purely real eigenvalues have the meaning of inverse lifetimes of corresponding nonpropagating relaxation processes. The corresponding eigenvectors allow to calculate so-called mode strengths (weights) of the dynamic eigenmodes in relevant time correlation functions or the dynamic structure factors. In this study the matrix elements of the generalized hydrodynamic matrix $\mathbf{T}(k)$ were estimated for each k -point directly from MD simulations avoiding any fitting procedure. The GCM analysis of MD-derived time correlation functions was performed within the thermoviscoelastic five-variable dynamic model for the case of longitudinal dynamics

$$\mathbf{A}^{(5)}(k,t) = \{n(k,t), J^L(k,t), h(k,t), \dot{J}^L(k,t), \dot{h}(k,t)\}. \quad (3)$$

Every sixth timestep we sampled spatial Fourier transforms of density of particles $n(\mathbf{Q},t)$, density of mass-current $\mathbf{J}(\mathbf{Q},t)$, and energy density $e(\mathbf{Q},t)$ from the instantaneous positions $\mathbf{r}_i(t)$, velocities $\mathbf{v}_i(t)$ and single-particle energies $\varepsilon_i(t)$ of N particles as follows:

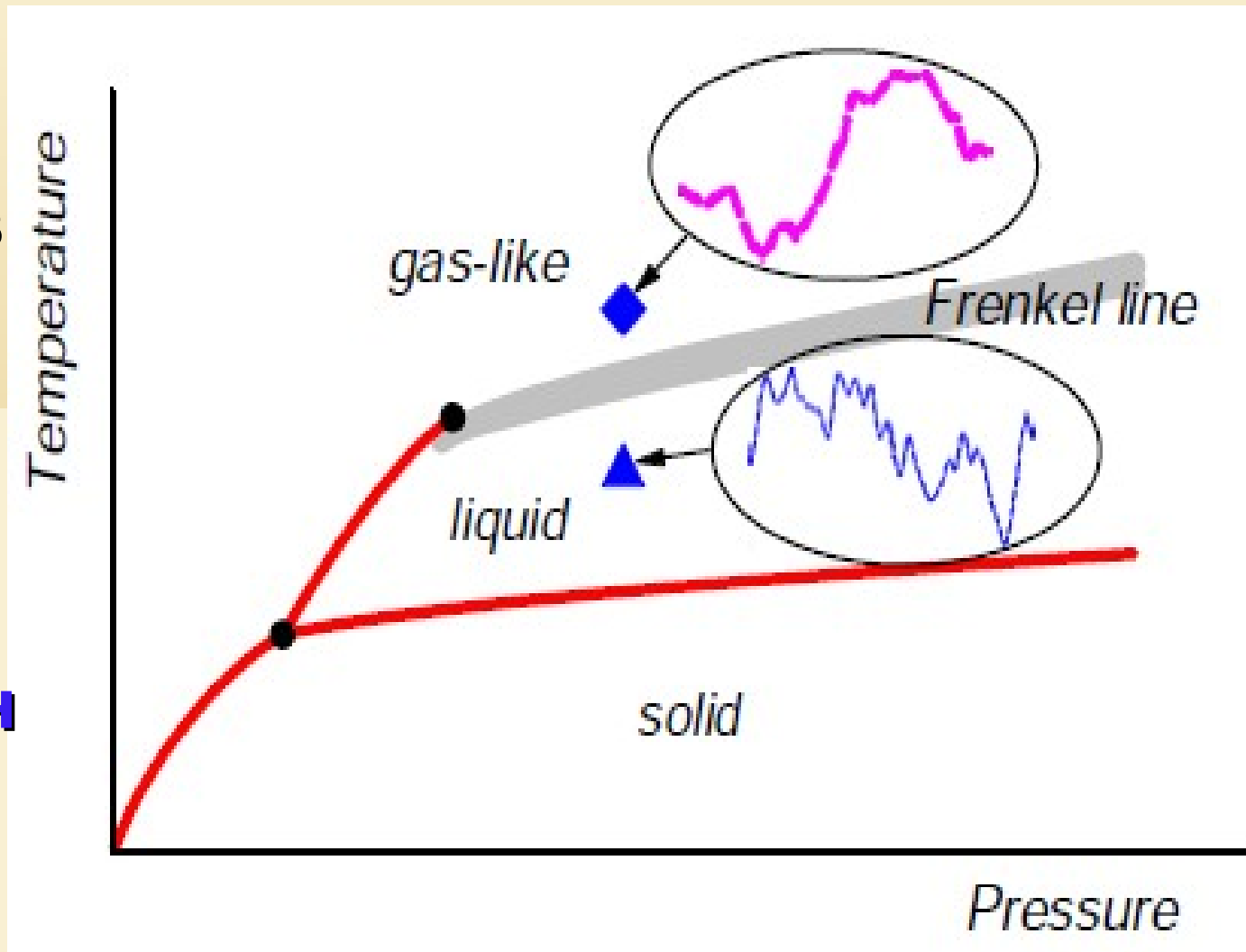
$$n(\mathbf{Q},t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{Q}\vec{r}_i(t)}, \quad \vec{J}(\mathbf{Q},t) = \frac{m}{\sqrt{N}} \sum_i \vec{v}_i e^{i\vec{Q}\vec{r}_i(t)}, \quad e(\mathbf{Q},t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \varepsilon_i e^{i\vec{Q}\vec{r}_i(t)}. \quad (1)$$

Мост между казигазовым и твердотельным описанием



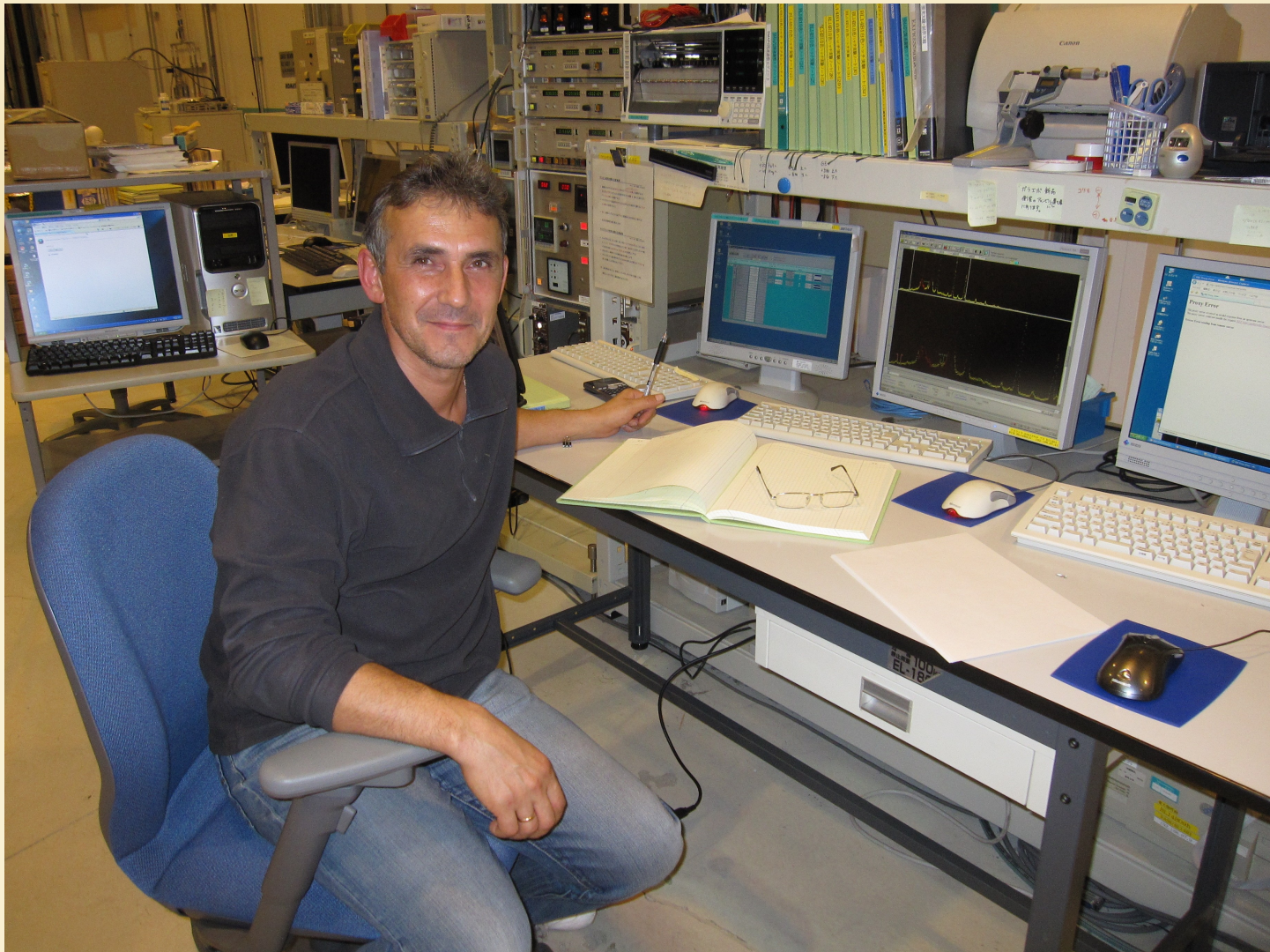
Вывод

«Твердая»
жидкость
переходит в
«газовую»
жидкость
путем
кроссовера.
Газовое и
твердотельн
ое описание
жидкости
«сшиваются»



» Жидкость - не «чистое» агрегатное состояние с точки зрения динамики

После 2 суток



После 4 суток



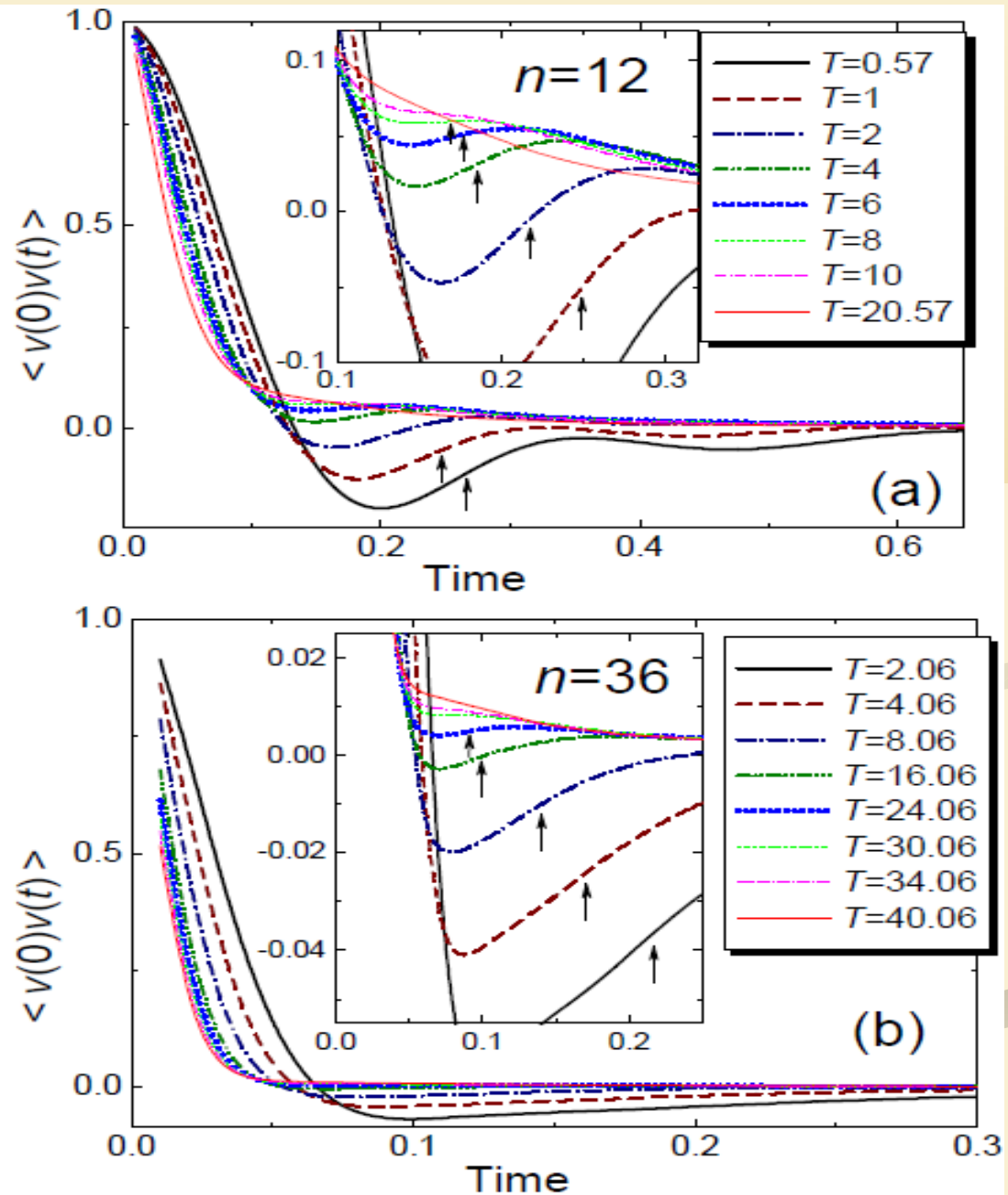
После 6 суток



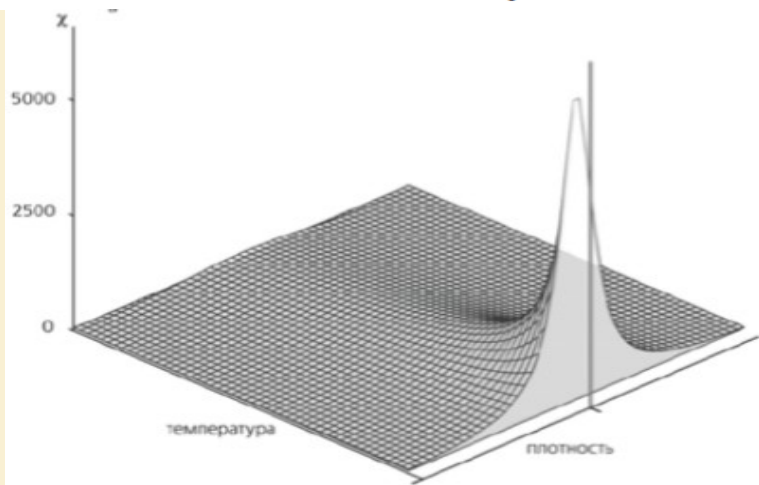
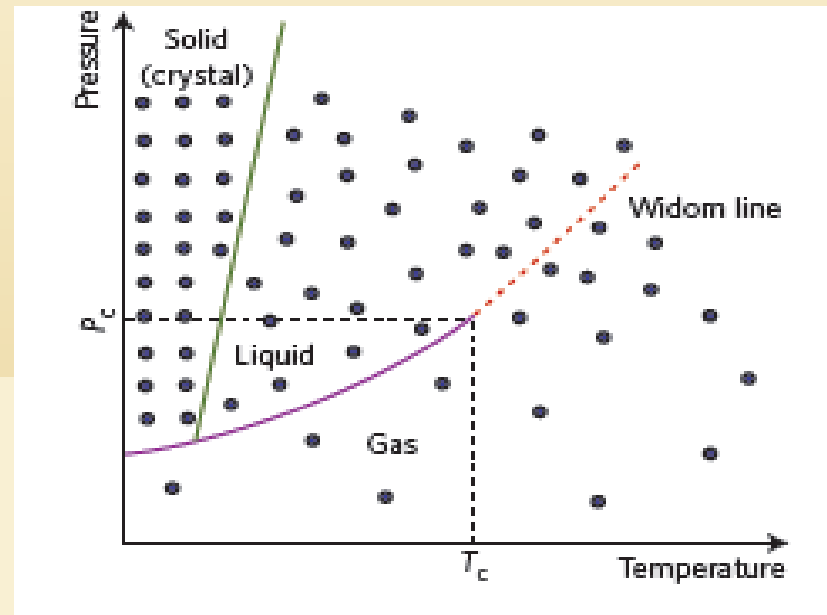
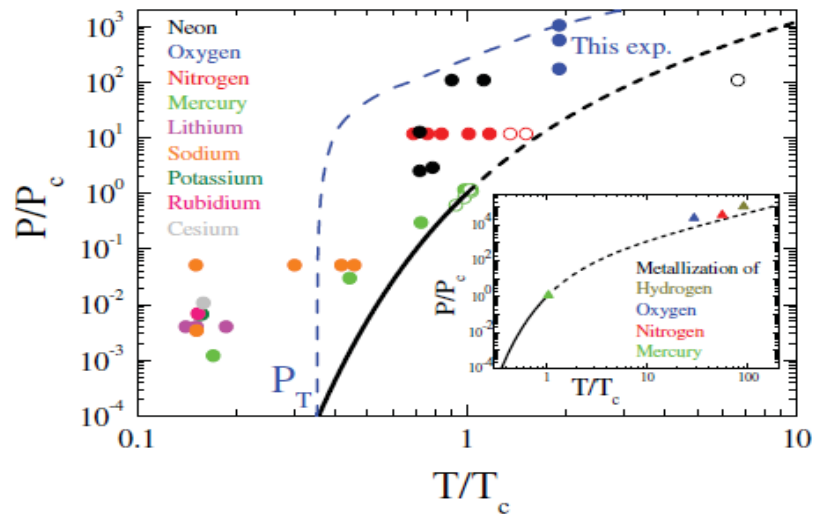
**СПАСИБО ВСЕМ ЗА ВНИМАНИЕ,
а М.В. САДОВСКОМУ- ЗА ПРИГЛАШЕНИЕ!**



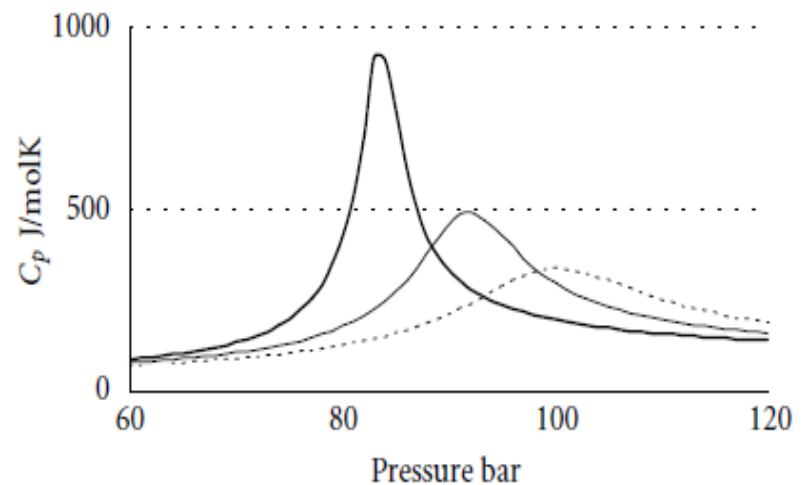
Inflection points in VAF for Soft sphere systems fluids



Thermodynamic continuation of boiling curve: Widom line

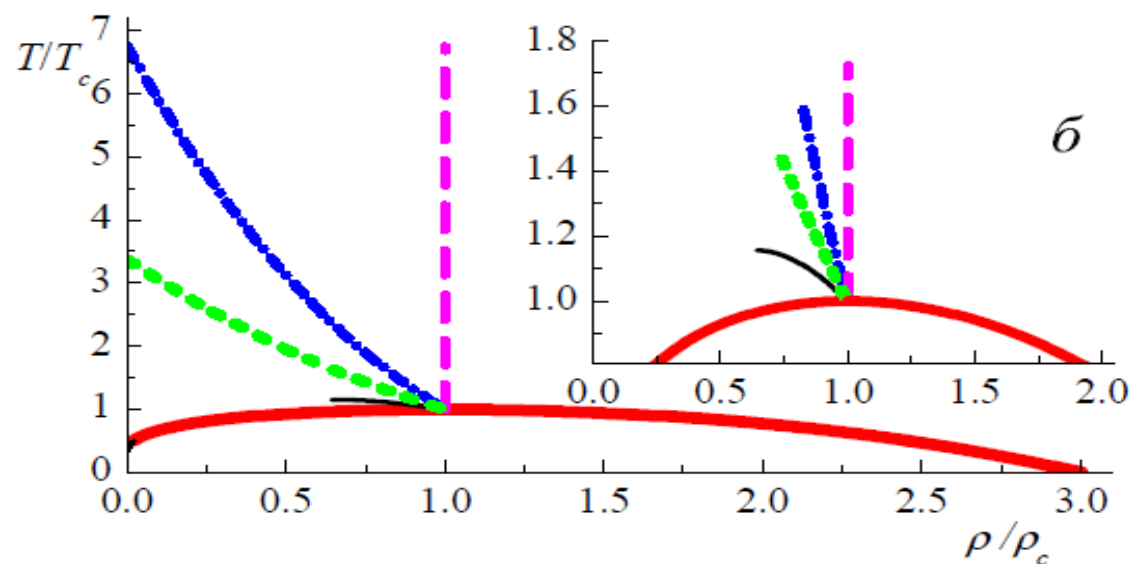
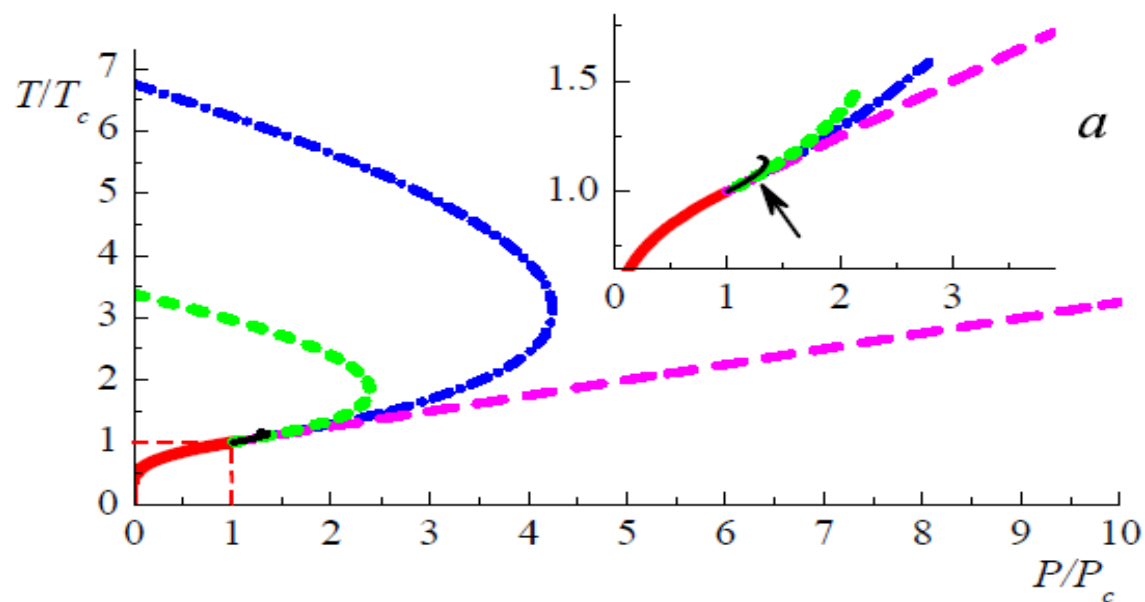


Коэффициент изотермического расширения вблизи критической точки



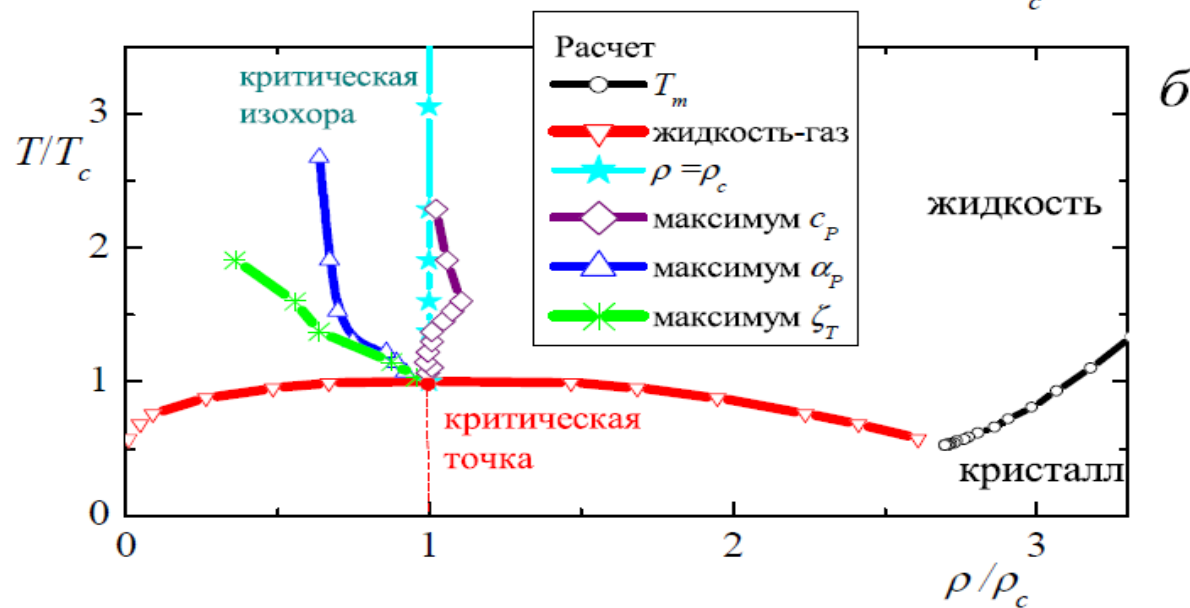
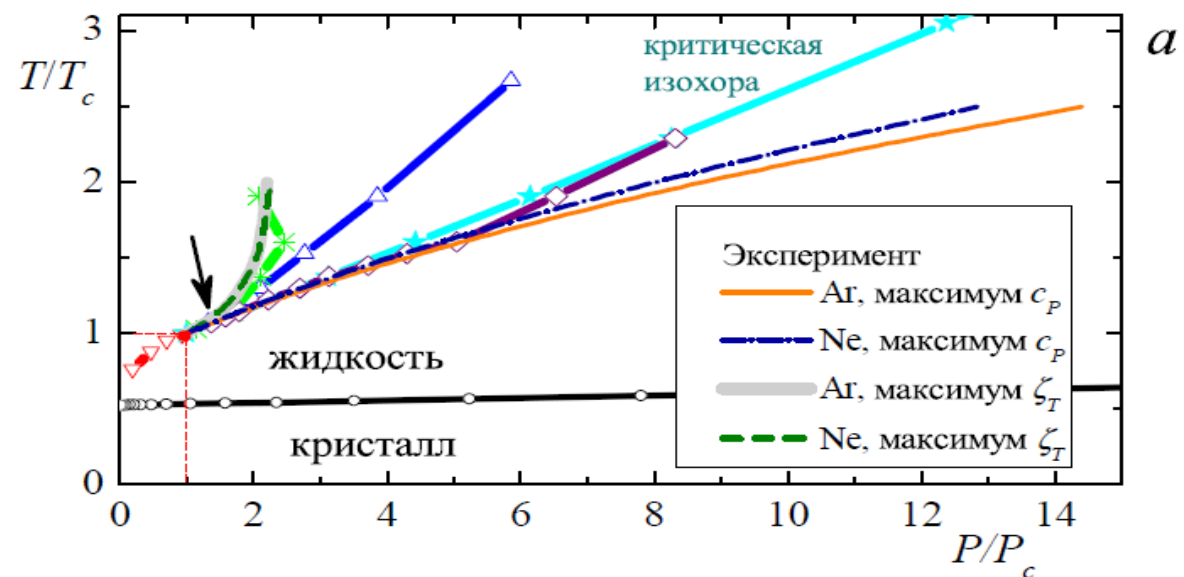
Van der Waals supercritical fluid: Exact formulas for special lines

V. V. Brazhkin^{a)} and V. N. Ryzhov



Widom Line for the Liquid–Gas Transition in Lennard-Jones System

V. V. Brazhkin,* Yu. D. Fomin, A. G. Lyapin, V. N. Ryzhov, and E. N. Tsiok



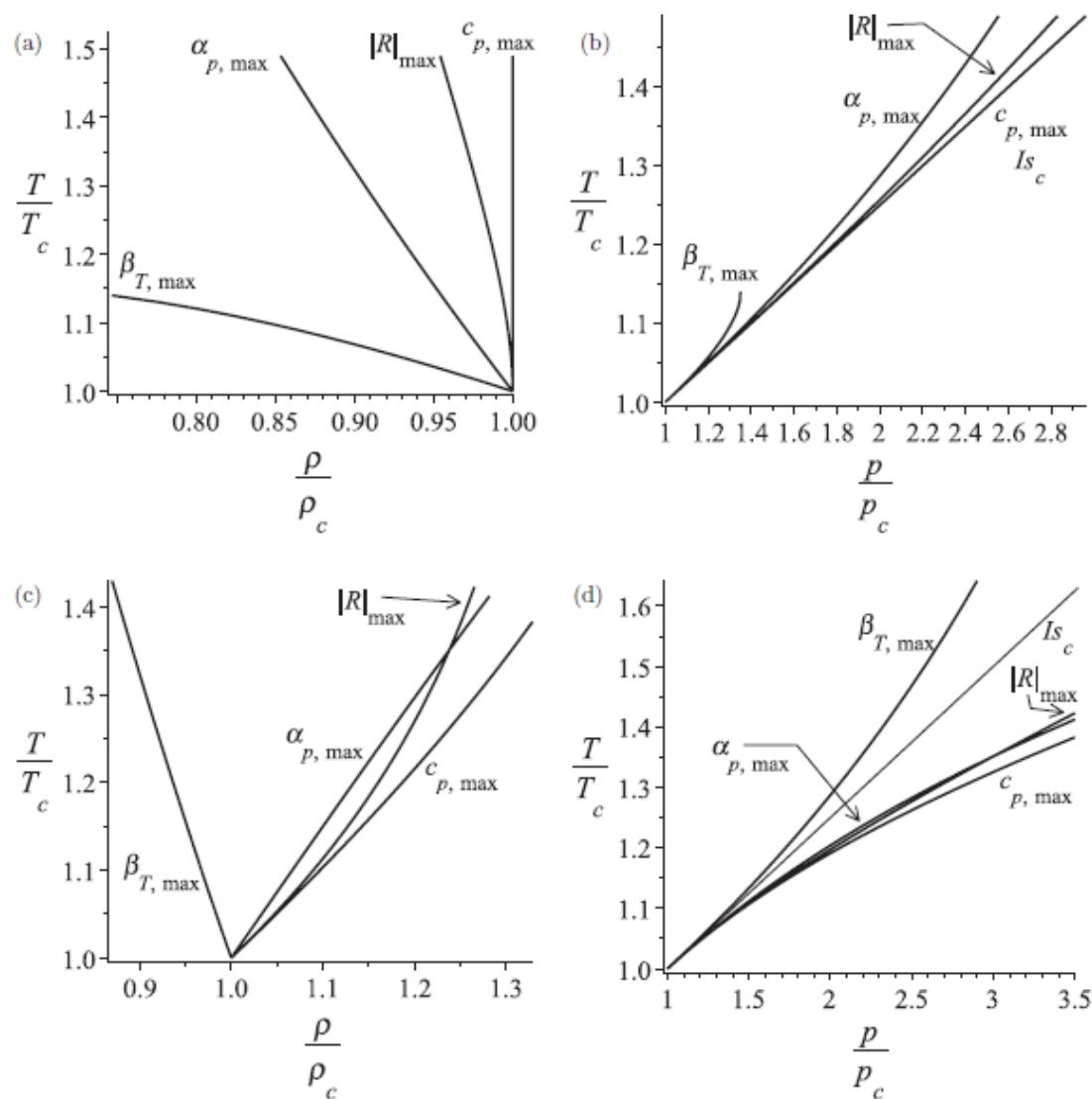


FIG. 5. (a),(b) Lines of maxima at constant temperature of the vdW fluid for the thermal expansion coefficient α_p , isothermal compressibility β_T , isobaric heat capacity c_p , and Riemannian thermodynamic scalar curvature $|R|$ in the ρ - T phase diagram (a) and the p - T phase diagram (b). (c),(d) Lines of maxima at constant pressure of the vdW fluid for the thermal expansion coefficient α_p , isothermal compressibility β_T , isobaric heat capacity c_p , and Riemannian thermodynamic scalar curvature in the ρ - T phase diagram (c) and the p - T phase diagram (d). Is_c denotes the critical isochore; the critical isochore lies on the $c_{p, \max}$ line in (b).

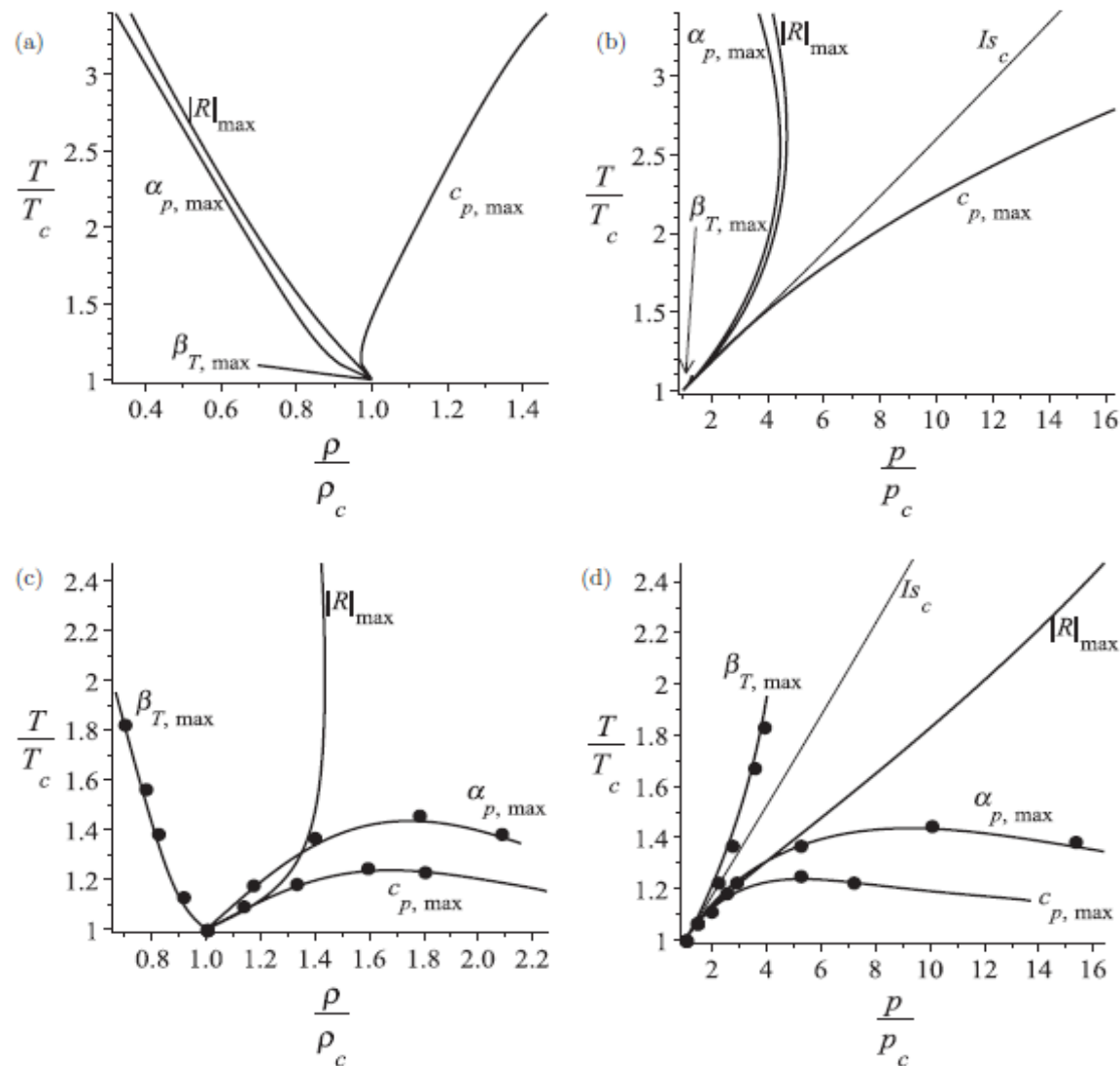


FIG. 3. (a),(b) Lines of maxima at constant temperature of the LJ fluid for the thermal expansion coefficient α_p , isothermal compressibility β_T , isobaric heat capacity c_p , and Riemannian thermodynamic scalar curvature R in the ρ - T phase diagram (a) and the p - T phase diagram (b). (c),(d) Lines of maxima at constant pressure of the LJ fluid for the thermal expansion coefficient α_p , isothermal compressibility β_T , isobaric heat capacity c_p , and Riemannian thermodynamic scalar curvature in the ρ - T phase diagram (c) and the p - T phase diagram (d). The solid circles are calculated from the Kolafa-Nezbeda EOS [14]. Is_c denotes the critical isochore.

