

## Микроскопическая динамика аморфной фуллереновой смеси $C_{60x}/C_{70(1-x)}$

© Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин, И.Д. Тахавиев

Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
Казань, Россия

E-mail: khrm@mail.ru, anatolii.mokshin@mail.ru

(Поступила в Редакцию 25 августа 2014 г.)

В работе представлены результаты исследования механизма распространения коллективных возбуждений в аморфных фуллереновых смесях  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  (при эквимолярной концентрации  $x = 0.50$ ), полученные с помощью моделирования молекулярной динамики. По изменению поведения параметра Вендта–Абрахама определена критическая температура стеклования системы, которая составила  $T_c = 1548$  К. Рассчитаны спектральные плотности временных корреляционных функций продольного  $\tilde{C}_L(k, \omega)$  и поперечного  $\tilde{C}_T(k, \omega)$  потоков для широкой области значений волновых чисел при температурах ниже температуры стеклования. Установлено, что в аморфных фуллереновых смесях  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  динамика флуктуаций плотности характеризуется двумя дисперсионными акустикоподобными ветвями продольной и поперечной поляризации. Установлено влияние полидисперсности и фактора формы молекулы компоненты смеси на микроскопическую динамику флуктуации плотности в многокомпонентных системах.

Работа частично выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности. Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

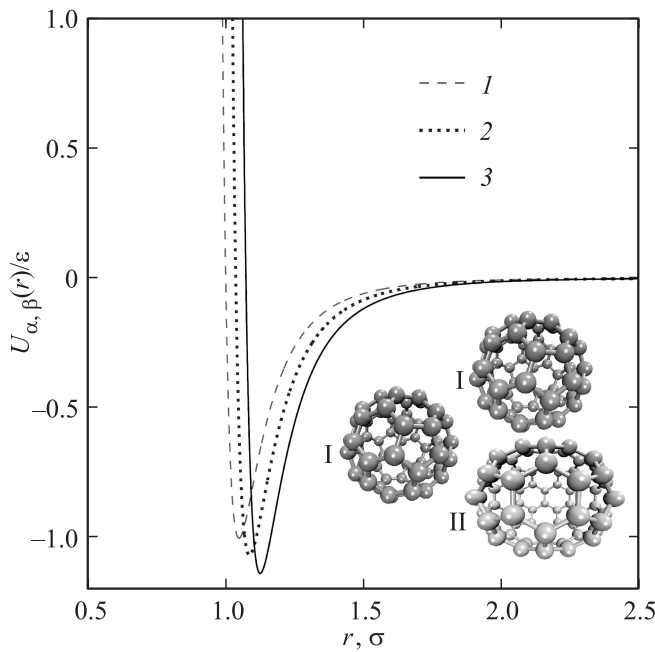
### 1. Введение

Большое число работ, связанных с изучением свойств фуллереновых систем (молекулярных форм углерода  $C_n$  ( $n \in [20; 720]$ )), ограничивается рассмотрением однокомпонентных систем [1–3]. Наиболее изученными здесь, вероятно, являются системы, состоящие из молекул  $C_{60}$  и  $C_{70}$  [4–7]. Так, в работе [8] были выполнены экспериментальные исследования электропроводности кристаллов фуллерена  $C_{60}$  в зависимости от давления, оказываемого на систему. Было установлено, что при увеличении давления от 100 до 200 kbar происходит увеличение электропроводности кристалла на несколько порядков. Детальные исследования энергетического спектра фуллерена  $C_{60}$  недавно были выполнены в [9]. Анализ линейчатых спектров поглощения и излучения молекул фуллеренов  $C_{70}$  в монокристаллическом толуоле был представлен в работе [10]. Численные и теоретические исследования стекольного перехода в однокомпонентных фуллереновых системах  $C_{60}$ ,  $C_{70}$  и  $C_{96}$ , выполненные с помощью парноаддитивного потенциала межмолекулярного взаимодействия, были представлены в [11]. В работе [12] был выполнен сравнительный анализ результатов моделирования для системы фуллеренов  $C_{60}$ , где использовались атомистический модельный потенциал внутри- и межмолекулярного взаимодействия и эффективный потенциал межмолекулярного взаимодействия (моноатомная модель) Жирифалько. Исследование было выполнено для широкой области значений давлений (свыше 200 kbar) в температурной области

от 300 до 1900 К. Было установлено хорошее согласие результатов моделирования с экспериментальными данными для равновесных структурных характеристик, в частности для радиальной функции распределения молекул, уравнения состояния и ряда термодинамических свойств. Данное исследование показало эффективность моноатомной модели потенциала Жирифалько при описании структурных характеристик фуллереновых систем. Фазовые диаграммы для двух различных однокомпонентных фуллереновых систем  $C_{60}$  и  $C_{70}$ , рассчитанные на основе шести модельных короткодействующих потенциалов, были представлены в [13]. В работе было установлено, что бинальные кривые (жидкость–пар) для этих систем корректно воспроизводятся расчетами, осуществляемыми на основе потенциала Жирифалько. Обобщение эффективной моноатомной модели Жирифалько на случай бинарной фуллереновой смеси  $C_{60}/C_{70}$  было реализовано в [14]. Результаты исследования микроскопических свойств фуллереновых смесей  $C_{60}/C_n$  ( $n = 70, 76, 84, 96$ ) в зависимости от концентрации молекул  $C_{60}$  представлены в работе [15].

Несмотря на интенсивные экспериментальные и теоретические исследования молекулярных форм углерода, особенности микроскопической молекулярной динамики в фуллереновых смесях в аморфной фазе в научной литературе практически не обсуждаются.

Настоящая работа посвящена исследованию стеклования и микроскопических механизмов формирования коллективных возбуждений в фуллереновых смесях  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  (при эквимолярной концентрации  $x = 0.50$ ).



**Рис. 1.** Потенциал взаимодействия между молекулами фуллеренов. 1 — энергия взаимодействия между фуллеренами  $C_{60}$ , 2 — энергия взаимодействия между молекулами  $C_{70}$ , 3 — энергия взаимодействия между молекулами  $C_{60}$  и  $C_{70}$ . Молекулы фуллеренов  $C_{60}$  и  $C_{70}$  обозначены соответственно символами I и II.

## 2. Детали моделирования

Исследуемая система состояла из 19 652 молекул (по 9826 молекул фуллеренов  $C_{60}$  и  $C_{70}$  при эквимолярной концентрации  $x = 0.50$ ), расположенных в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Взаимодействие между молекулами осуществлялось с помощью эффективного потенциала межмолекулярного взаимодействия Жирифалько [14–17]

$$U_{\alpha\beta}(r) = -\frac{\eta_{\alpha\beta}}{s_{\alpha\beta}} \left[ \frac{1}{(s_{\alpha\beta} - 1)^3} + \frac{1}{(s_{\alpha\beta} + 1)^3} - \frac{1}{(s_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta})^3} - \frac{1}{(s_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha\beta})^3} \right] + \frac{\lambda_{\alpha\beta}}{s_{\alpha\beta}} \left[ \frac{1}{(x_{\alpha\beta} - 1)^9} + \frac{1}{(s_{\alpha\beta} + 1)^9} - \frac{1}{(s_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta})^9} - \frac{1}{(s_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha\beta})^9} \right]. \quad (1)$$

Здесь  $s_{\alpha\beta} = r/\sigma_{\alpha\beta}$ ,  $\sigma_{\alpha\beta} = (a_{\alpha} + a_{\beta})$  — эффективный размер молекулы фуллерена,  $\delta_{\alpha\beta} = (a_{\alpha} - a_{\beta})/(a_{\alpha} + a_{\beta})$ , коэффициенты  $\eta_{\alpha\beta}$  и  $\lambda_{\alpha\beta}$  определяются соотношениями

$$\eta_{\alpha\beta} = \frac{\epsilon_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta}^6}{12 a_{\alpha} a_{\beta} (a_{\alpha} + a_{\beta})^4}, \quad \lambda_{\alpha\beta} = \frac{\epsilon_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta}^{12}}{9 a_{\alpha} a_{\beta} (a_{\alpha} + a_{\beta})^{10}}, \quad (2)$$

где  $\epsilon$  — величина, характеризующая глубину потенциальной ямы. На рис. 1 представлен потенциал межмолекулярного взаимодействия для фуллереновой смеси  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$ .

Для удобства все величины будут измеряться в приведенных единицах: длины — в единицах  $\sigma$ , энергия — в единицах  $\epsilon$ , температура — в единицах  $k_B T/\epsilon$ , время — в единицах  $\tau = \sqrt{m\sigma^2/\epsilon}$ , где  $m$  — масса молекулы фуллерена  $C_{60}$ ,  $k_B$  — постоянная Больцмана.

Молекулярно-динамические расчеты выполнялись в НрН-ансамбле при давлении  $p^* = 0.07$  ( $p = 3.5$  МПа) в температурном диапазоне  $T^* = [0.400-0.625]$  ( $T = [1287-2011]$  К). Скорость охлаждения системы составила  $\gamma^* = 0.0016$  ( $\gamma = 10^{12}$  К/с). Интегрирование уравнений движений молекул выполнялось с помощью алгоритма Верлэ в скоростной форме с временным шагом  $dt^* = 0.001$  ( $dt = 5.0$  fs) [18]. Для приведения системы в состояние термодинамического равновесия было выполнено 50 000 временных шагов. Для сокращения времени вычислений взаимодействие частиц на расстояниях  $r_{\text{cut}} = 2.5\sigma$  не учитывалось.

## 3. Результаты моделирования

Одной из величин, характеризующих структуру исследуемой системы, является функция радиального распределения двух частиц  $g(r)$  [19,20]

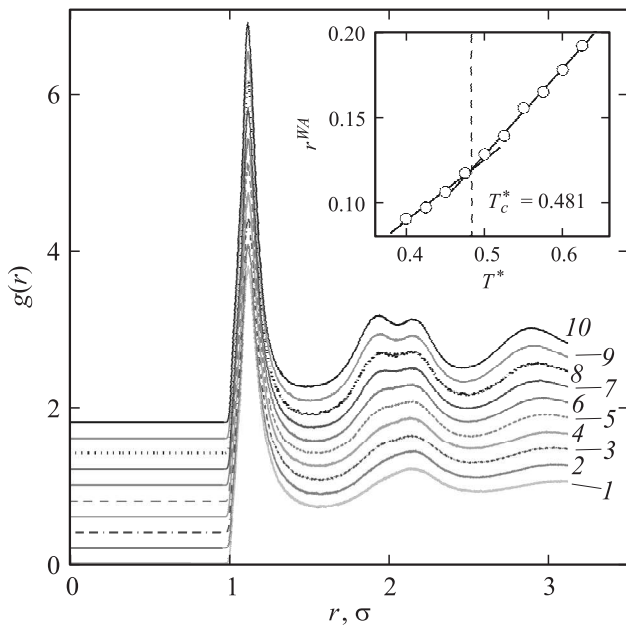
$$g(r) = x_A b_A^{*2} g_{A,A}(r) + x_B b_B^{*2} g_{B,B}(r) + 2\sqrt{x_A x_B} b_A^* b_B^* g_{A,B}(r). \quad (3)$$

Здесь  $g_{\alpha\beta}(r)$  — парциальные компоненты радиальной функции распределения молекул [21,22]

$$g_{\alpha\beta}(r) = \frac{L^3}{N_{\alpha} N_{\beta}} \left\langle \sum_{j=1}^{N_{\alpha}} \frac{n_{j\beta}(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \right\rangle, \quad \alpha, \beta \in \{C_{60}, C_{70}\}, \quad (4)$$

определяющие плотность вероятности расположения пары молекул в диапазоне от  $r$  до  $r + \Delta r$ . Величина  $n_{j\beta}(r)$  определяет число молекул сорта  $\beta$  в сферическом слое толщиной  $\Delta r$  на расстоянии  $r$  от  $j$ -й молекулы,  $L$  — длина ребра моделируемой ячейки,  $N_{\alpha}$  и  $N_{\beta}$  — числа молекул сорта  $\alpha$  и  $\beta$  соответственно. Величины  $x_A = n_A/(n_A + n_B)$ ,  $x_B = n_B/(n_A + n_B)$  — концентрации молекул фуллеренов  $C_{60}$  и  $C_{70}$  соответственно;  $b_j^* = b_j/(x_A b_A^2 + x_B b_B^2)^{1/2}$  — нормированная длина рассеяния молекулы  $j$ -сорта ( $b_A$  и  $b_B$  — длины рассеяния молекул  $C_{60}$  и  $C_{70}$  соответственно). Длину рассеяния рассматриваем как величину, соизмеримую с размером молекулы фуллерена  $C_n$ :  $a_n = a_{60} \sqrt{n/60}$ , где  $a_{60}$  — размер молекулы  $C_{60}$  [17].

На рис. 2 представлена температурная зависимость радиальной функции распределения молекул фуллеренов для системы  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  (при эквимолярной концентрации  $x = 0.50$ ) при давлении  $p^* = 0.07$ . Из рисунка видно, что с уменьшением температуры пики в функции распределения становятся более выраженными, наблюдается расщепление второго пика. Как известно, такие особенности в поведении радиальной функции свидетельствуют о формировании локальных структур и характерны для аморфных материалов [23].



**Рис. 2.** Температурная зависимость радиальной функции распределения молекул фуллеренов для системы  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  ( $x = 0.50$ ).  $T, \varepsilon/k_B$ : 1 — 0.625, 2 — 0.600, 3 — 0.575, 4 — 0.550, 5 — 0.525, 6 — 0.500, 7 — 0.475, 8 — 0.450, 9 — 0.525, 10 — 0.400. На вставке — зависимость параметра Вендта–Абрахама от температуры.

Для оценки температуры перехода из жидкого состояния в аморфную фазу был рассчитан параметр порядка Вендта–Абрахама [24]  $r^{WA} = g_{\min(1)}/g_{\max(1)}$ . Здесь  $g_{\max(1)}$  и  $g_{\min(1)}$  представляют значения первого максимума и первого минимума радиальной функции распределения частиц соответственно. На вставке к рис. 2 представлена температурная зависимость параметра Вендта–Абрахама. По пересечению интерполяционных линий в параметре порядка  $r^{WA}$  была определена критическая температура стеклования системы  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  (при  $x = 0.50$ ), которая составила  $T_c^* = 0.481$  ( $T_c^* = 1548$  К).

Следует отметить, что в работе [25] была найдена критическая температура стеклования для системы фуллеренов  $C_{60}$ , которая составила  $T_c^* = 0.342$  ( $T_c = 1100$  К) при давлении  $p^* = 0.07$  ( $p = 3.5$  МПа). Таким образом, критическая температура стеклования фуллереновой смеси  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  (при  $x = 0.50$ ) оказывается значительно выше температуры  $T_c$  однокомпонентной системы  $C_{60}$ . Очевидно, что увеличение температуры стеклования может быть связано с наличием в системе  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  несферических молекул  $C_{70}$  (параметр несферичности  $S_0 = 0.0033$ ), что вносит дополнительную структурную неупорядоченность, которая в свою очередь может оказывать влияние также на микроскопическую коллективную динамику частиц.

Для анализа коллективных свойств аморфной фуллереновой смеси нами выполнен расчет спектральной плотности временных корреляционных функций про-

дольного ( $L$ ) и поперечного ( $T$ ) потоков

$$\tilde{C}_\alpha(k, \omega) = x_A b_A^* \tilde{C}_\alpha^{AA}(k, \omega) + x_B b_B^{*2} \tilde{C}_\alpha^{BB}(k, \omega) + 2\sqrt{x_A x_B} b_A^* b_B^* \tilde{C}_\alpha^{AB}(k, \omega), \quad \alpha = \{L, T\}, \quad (5)$$

а также плотности вибрационных состояний молекул [26]

$$g(\omega) = \frac{\omega}{2\pi(x_A + x_B)} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} [x_A \phi_A(t) + x_B \phi_B(t)] e^{i\omega t} dt \right]^2 \quad (6)$$

Здесь

$$\tilde{C}_\alpha^{i,j}(k, \omega) = \frac{1}{t_M} \left| \int_0^{t_M} j_\alpha^{i,j}(k, t) e^{i\omega t} dt \right|^2, \quad (7)$$

где  $\alpha = \{L, T\}$  есть парциальные компоненты спектров продольного и поперечного потока,  $\phi(t)$  — автокорреляционная функция скорости молекул,

$$\phi_\beta(t) = \frac{\langle \mathbf{v}_\beta(0) \cdot \mathbf{v}_\beta(t) \rangle}{\langle \mathbf{v}_\beta(0) \cdot \mathbf{v}_\beta(0) \rangle}, \quad \beta \in \{C_{60}, C_{70}\}, \quad (8)$$

угловые скобки  $\langle \dots \rangle$  указывают на усреднение по молекулярным конфигурациям;  $\mathbf{v}_j(t)$  — вектор скорости  $j$ -й молекулы в момент времени  $t$ . Поточковые переменные, характеризующие распространение коллективных возбуждений в многочастичной системе, определяются соотношениями [27,28]

$$j_L(k, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N (\mathbf{e}_k, \mathbf{v}_l(t)) \exp[-i(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l(t))],$$

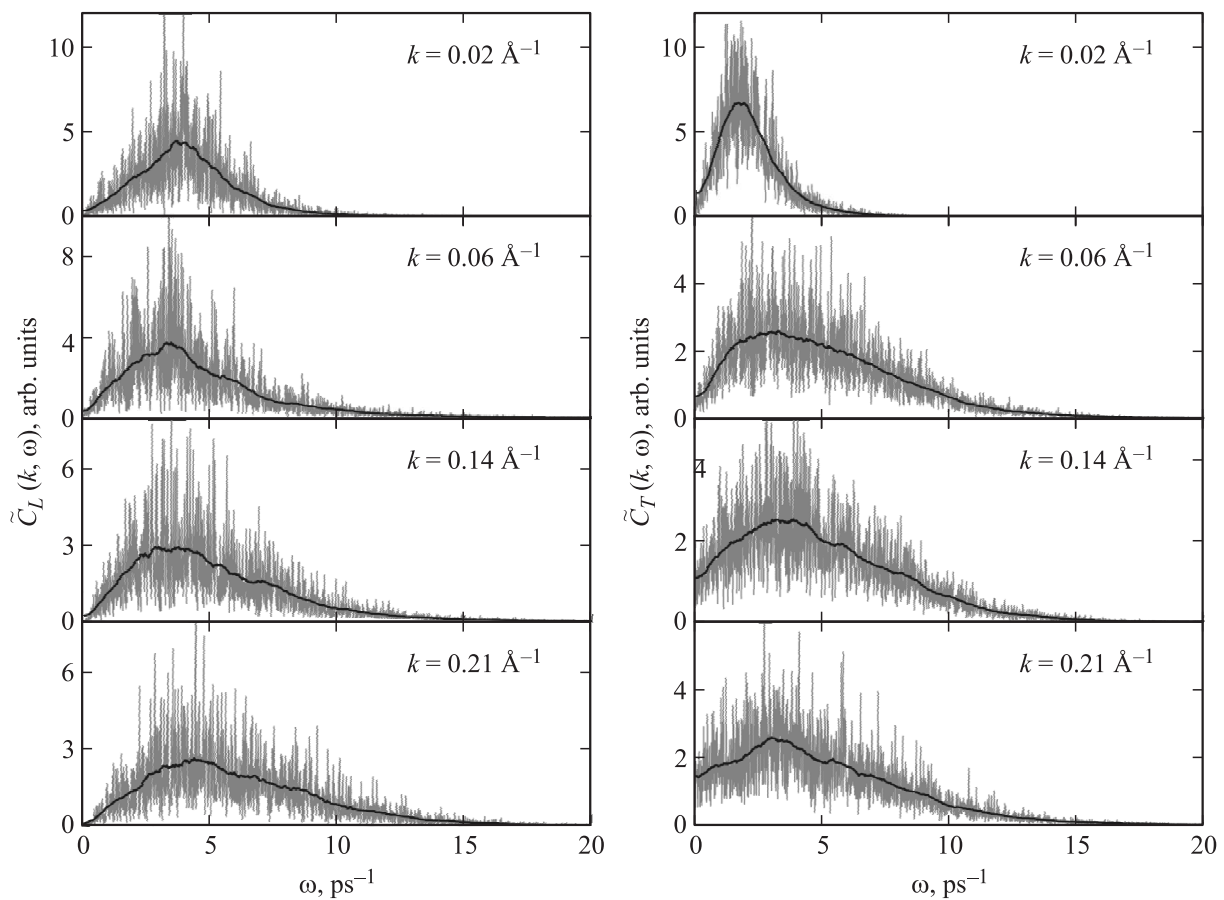
$$j_T(k, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N |[\mathbf{e}_k, \mathbf{v}_l(t)]| \exp[-i(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l(t))]. \quad (9)$$

Здесь круглыми и квадратными скобками обозначены соответственно скалярные и векторные произведения. Следует отметить, что спектральная плотность временной корреляционной функции продольного потока  $\tilde{C}_L(k, \omega)$  связана с экспериментально измеряемой величиной — динамическим структурным фактором  $S(k, \omega)$  — соотношением [29,30]

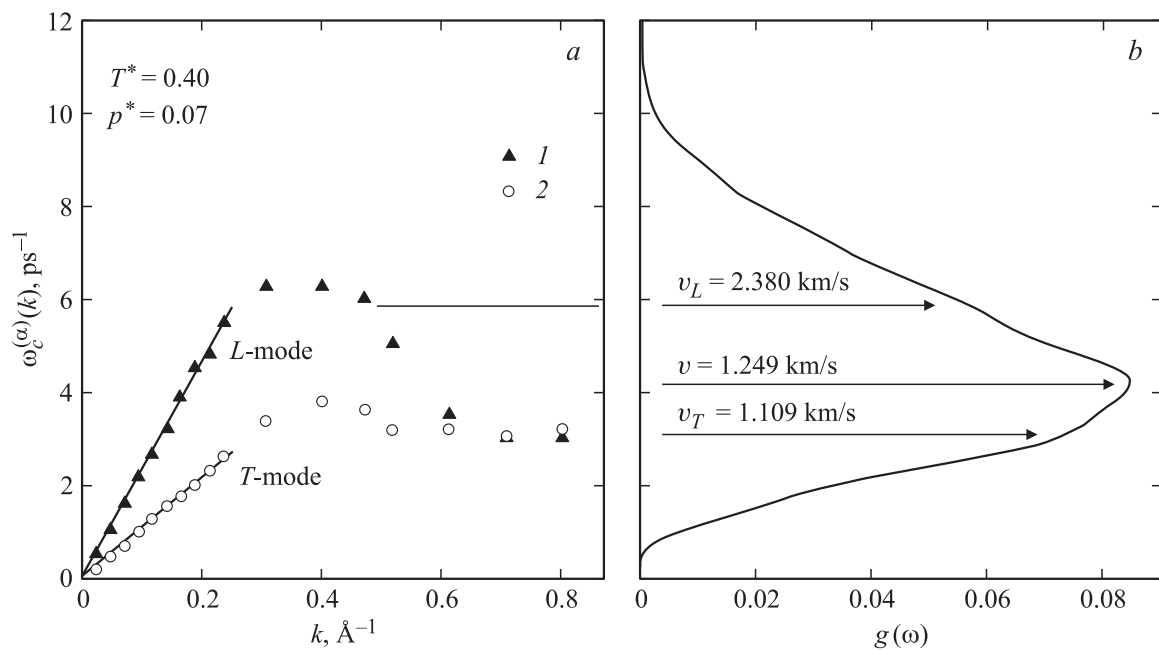
$$\tilde{C}_L(k, \omega) = \frac{\omega^2}{\Omega_1^2(k) S(k)} S(k, \omega). \quad (10)$$

Здесь  $S(k)$  — статический структурный фактор,  $\Omega_1^2(k) = \frac{k_B T}{m} \frac{k^2}{S(k)}$  — частотный релаксационный параметр, имеющий размерность квадрата частоты.

На рис. 3 представлены спектральные плотности временной корреляционной функции продольного  $\tilde{C}_L(k, \omega)$  и поперечного  $\tilde{C}_T(k, \omega)$  потоков для фуллереновой смеси  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  с эквимольарной концентрацией ( $x = 0.50$ ) при температуре  $T^* = 0.40$  для широкой области значений волновых чисел ( $0.02 \leq k \leq 0.21 \text{ \AA}^{-1}$ ).



**Рис. 3.** Спектральные плотности временной корреляционной функции продольного  $\tilde{C}_L(k, \omega)$  и поперечного  $\tilde{C}_T(k, \omega)$  потоков для фуллереновой смеси  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  при температуре  $T^* = 0.40$  и давлении  $p^* = 0.07$ .



**Рис. 4.** а) Дисперсия коллективных возбуждений  $\omega_c^{(\alpha)}(k)$  продольной  $\{\alpha \equiv L\}$  (1) и поперечной  $\{\alpha \equiv T\}$  (2) поляризации. Наклоны интерполяционных прямых к дисперсионным зависимостям в области малых волновых чисел определяют скорости звука с продольной  $v_L$  и поперечной  $v_T$  поляризации. б) Плотность вибрационных состояний молекул фуллеренов.

Значения скоростей звука в фуллереновой смеси  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  при температуре  $T^* = 0.40$  и давлении  $p^* = 0.07$

$x$	Скорость звука продольной поляризации, km/s				Скорость звука поперечной поляризации, km/s				Средняя скорость звука, km/s
	$v_L^{AA}$	$v_L^{BB}$	$v_L^{AB}$	$v_L$	$v_T^{AA}$	$v_T^{BB}$	$v_T^{AB}$	$v_T$	
0.25	2.430	2.933	2.693	2.692	1.949	1.900	1.900	1.908	2.068
0.50	2.164	2.663	2.335	2.380	1.134	1.133	1.087	1.109	1.249
0.75	2.211	2.139	2.382	2.273	0.868	0.922	0.870	0.882	1.000

Данные спектральные характеристики были рассчитаны на основе полученных результатов моделирования молекулярной динамики. Спектральные плотности временных корреляционных функций продольного и поперечного потоков определялись в соответствии с выражениями (9), (7) и (5).

Из рисунка видно, что в спектрах продольного потока  $\tilde{C}_L(k, \omega)$  наблюдаются распространяющиеся коллективные акустические возбуждения при  $k < 2\pi/\sigma$ , где  $\sigma$  — эффективный размер молекулы фуллерена [31]. В то же время в спектрах поперечного потока  $\tilde{C}_T(k, \omega)$  наблюдаются коллективные акустико-подобные возбуждения, подобные тем, что обнаруживаются в воде [32,33] и других жидкостях (например,  $SiO_2$ ,  $GeO_2$ ), близкий порядок в которых характеризуется тетраэдричностью [34,35].

На рис. 4 представлены дисперсионные кривые  $\omega_c^{(L)}(k)$  и  $\omega_c^{(T)}(k)$  для фуллереновой смеси, полученные на основе анализа соответствующих спектральных плотностей ( $a$ ), в сопоставлении с плотностью вибрационных состояний ( $b$ ). Из рисунка видно, что особенности спектров продольного и поперечного потоков интегральным образом содержатся и в плотности вибрационных состояний (ПВС). Кроме того, представленные на рис. 4 результаты указывают на отсутствие оптикоподобной ветви в законе дисперсии для аморфной фуллереновой смеси.

Вполне уместной представляется трактовка результатов, представленных на рис. 4, в сопоставлении с результатами работы [36], где анализировались кривые, характеризующие ПВС для переохлажденной воды. В частности, в работе [36] было установлено, что ПВС переохлажденной воды характеризуется двумя выраженными пиками. При этом форма ПВС может быть описана/воспроизведена линейной комбинацией трех лоренцевых функций, которые, согласно [36], могут быть связаны с колебательными степенями свободы, ответственными за деформирование молекул (изгиб, скручивание и растяжение). Данные рис. 4 подводят к несколько иной интерпретации особенностей, проявляемых в плотности вибрационных состояний. Так, в области высоких значений волнового числа  $k$  (в рассматриваемом случае при  $k > 0.25 \text{ \AA}^{-1}$ ) дисперсионные кривые характеризуют одночастичную коллективную динамику. Из рис. 4 видно, что молекулярные движения, связанные с формированием акустикоподобных волн поперечной

поляризации, определяют особенности правого (низкочастотного) крыла ПВС, в то время как молекулярные колебательные процессы, вносящие вклад в формирование волн продольной поляризации, формируют левое (высокочастотное) крыло ПВС.

В кристалле могут распространяться как продольные, так и поперечные звуковые волны [27]. При этом в одном и том же направлении распространяется одна продольная звуковая волна, тогда как поперечных звуковых волн должно быть две [28,29]. Тогда средняя скорость звука в твердотельном приближении будет определяться соотношением [7,37]

$$\frac{3}{v^3} = \frac{2}{v_T^3} + \frac{1}{v_L^3}, \tag{11}$$

где

$$v_\alpha = x_A b_A^{*2} v_\alpha^{AA} + x_B b_B^{*2} v_\alpha^{BB} + 2\sqrt{x_A x_B} b_A^* b_B^* v_\alpha^{AB},$$

$$\alpha = \{L, T\}, \quad A = C_{60}, \quad B = C_{70}. \tag{12}$$

Рассчитанные в соответствии с (11) и (12) значения  $v_\alpha$  для фуллереновой смеси  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  (где  $x = 0.25, 0.50, 0.75$ ) при температуре  $T^* = 0.40$  и давлении  $p^* = 0.07$  представлены в таблице.

Результаты, представленные в таблице, указывают на то, что увеличение концентрации молекул  $C_{60}$  (в диапазоне  $x \in [0.25; 0.75]$ ) приводит к уменьшению скорости распространения акустикоподобных возбуждений в данной системе. Так, средняя скорость звука  $v$  уменьшается более чем в 2 раза.

#### 4. Заключение

С помощью моделирования молекулярной динамики на основе эффективной модели потенциала межмолекулярного взаимодействия выполнены численные исследования особенностей микроскопической динамики аморфной фуллереновой смеси  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  (при эквимолярной концентрации  $x = 0.50$ ) ниже критической температуры стеклования. На основе анализа спектров поперечного потока установлено наличие акустикоподобных коллективных возбуждений в аморфной фуллереновой смеси. Рассчитаны скорости распространения акустических волн в аморфных фуллереновых смесях  $C_{60x}/C_{70(1-x)}$  при различных концентрациях молекул  $C_{60}$

( $x = 0.25, 0.50, 0.75$ ). Установлено, что увеличение концентрации приводит к заметному уменьшению скорости распространения звука в системе.

## Список литературы

- [1] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. *Nature* **318**, 162 (1985).
- [2] W. Krätschmer, L.D. Lamb, K. Fostiropoulos, D.R. Huffman. *Nature* **347**, 354 (1990).
- [3] В.В. Бражкин, А.Г. Ляпин, С.Г. Ляпин, С.В. Попова, Р.Н. Волошин, Ю.А. Ключев, А.М. Налетов, Н.Н. Мельник. *УФН* **167**, 1019 (1997).
- [4] А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов. *УФН* **165**, 977 (1995).
- [5] В.В. Бражкин, А.Г. Ляпин. *УФН* **166**, 893 (1996).
- [6] В.К. Малиновский, Н.В. Суворцев, А.П. Шебанин. Письма в *ЖЭТФ* **72**, 88 (2000).
- [7] В.Д. Бланк, А.А. Нуждин, В.М. Прохоров, Р.Х. Баграмов. *ФТТ* **40**, 1387 (1998).
- [8] Ю.А. Осипьян, В.Е. Фортов, К.Л. Каган, В.В. Кведер, В.И. Кулаков, А.Н. Курьянчик, Р.К. Николаев, В.И. Постнов, Н.С. Сидоров. Письма в *ЖЭТФ* **75**, 680 (2002).
- [9] Г.И. Миронов, А.И. Мурзашев. *ФТТ* **53**, 2273 (2011).
- [10] Д.К. Нельсон, Б.С. Разбирин, В.П. Смирнов, А.Н. Старухин. Письма в *ЖЭТФ* **98**, 419 (2013).
- [11] M.J. Greenall, Th. Voigtmann. *J. Chem. Phys.* **125**, 194 511 (2006).
- [12] M.C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa, G. Pellicane, R. Ruberto. *Phys. Rev. E* **69**, 031 112 (2004).
- [13] P. Orea. *J. Chem. Phys.* **130**, 104 703 (2009).
- [14] K. Kniąż, J.E. Fischer, L.A. Girifalco, A.R. McGhie, R.M. Strongin, A.V. Smith III. *Solid State Commun.* **96**, 739 (1995).
- [15] R. Ruberto, M.C. Abramo, C. Caccamo. *Phys. Rev. B* **70**, 155 413 (2004).
- [16] L.A. Girifalco. *J. Chem. Phys.* **95**, 5370 (1991).
- [17] V.I. Zubov, I.V. Zubov. *J. Phys. Chem. B* **109**, 14 627 (2005).
- [18] А.В. Мокшин, А.В. Чванова, Р.М. Хуснутдинов. *ТМФ* **171**, 135 (2012).
- [19] U. Balucani, M. Zoppi. *Dynamics of the liquid state*. Clarendon, Oxford (1994). 352 p.
- [20] В.Ф. Турчин. *Медленные нейтроны*. Госатомиздат, М. (1963). 372 с.
- [21] Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин, И.И. Хадеев. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* **1**, 90 (2014).
- [22] R.M. Khusnutdinoff, A.V. Mokshin. *J. Non-Cryst. Solids* **357**, 1677 (2011).
- [23] А.В. Мокшин, С.О. Забегаев, Р.М. Хуснутдинов. *ФТТ* **53**, 532 (2011).
- [24] Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин. *Изв. РАН. Сер. физ.* **74**, 677 (2010).
- [25] M.C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa, R. Ruberto. *J. Phys. Chem. B* **108**, 13 576 (2004).
- [26] R.M. Khusnutdinoff, A.V. Mokshin. *Physica A* **391**, 2842 (2012).
- [27] D. Pines. *Elementary excitations in solids*. W.A. Benjamin, Inc., NY–Amsterdam (1963). 229 p.
- [28] Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин. Письма в *ЖЭТФ* **100**, 42 (2014).
- [29] А.В. Мокшин, Р.М. Юльметьев, Р.М. Хуснутдинов, П. Ханги. *ЖЭТФ* **130**, 974 (2006).
- [30] Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин, Р.М. Юльметьев. *ЖЭТФ* **135**, 477 (2009).
- [31] A.V. Mokshin, R.M. Yulmetyev, R.M. Khusnutdinoff, P. Hänggi. *J. Phys.: Cond. Matter* **19**, 046 209 (2007).
- [32] P. Jedlovsky, G. Garberoglio, R. Vallauri. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 19 823 (2011).
- [33] Р.М. Хуснутдинов. *Коллоид. журн.* **75**, 792 (2013).
- [34] B. Ruzicka, T. Scopigno, S. Caponi, A. Fontana, O. Pilla, P. Giura, G. Monaco, E. Pontecorvo, G. Ruocco, F. Sette. *Phys. Rev. B* **69**, 100 201 (2004).
- [35] L.E. Bove, E. Fabiani, A. Fontana, F. Paoletti, C. Petrillo, O. Pilla, I.C.V. Bento. *Europhys. Lett.* **71**, 563 (2005).
- [36] P. Jedlovsky, G. Garberoglio, R. Vallauri. *J. Phys.: Cond. Matter* **22**, 284 105 (2010).
- [37] J.P. Hansen, I.R. McDonald. *Theory of simple liquids*. Academic Press, NY (2006). 428 p.