Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою http://www.icmp.lviv.ua/

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (http://www.icmp.lviv.ua/)

Богдан Богданович Марків
Ігор Петрович Омелян
Михайло Васильович Токарчук

Нерівноважний статистичний оператор в узагальненій молекулярній гідродинаміці рідин

Роботу отримано 28 листопада 2007 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України

Національна академія наук України

ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ICMP–07–16U

Б.Б. Марків, І.П. Омелян, М.В. Токарчук

НЕРІВНОВАЖНИЙ СТАТИСТИЧНИЙ ОПЕРАТОР В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОЛЕКУЛЯРНІЙ ГІДРОДИНАМІЦІ РІДИН

ЛЬВІВ

УДК: 536.75; 536-12.01.

PACS: 05.20.Dd, 05.60.+w, 52.25.Fi, 71.45.G, 82.20.M

Нерівноважний статистичний оператор в узагальненій молекулярній гідродинаміці рідин

Б.Б. Марків, І.П. Омелян, М.В. Токарчук

Анотація. Обговорено важливу роль методу нерівноважного статистичного оператора Д.М. Зубарєва в узагальненій молекулярній гідродинаміці рідин. Використання цього методу дало можливість розвинути послідовний підхід узагальнених колективних збуджень для іонних, полярних, магнітних та інших рідин. Отримано нерівноважний статистичний оператор і відповідні рівняння переносу для системи, що релаксує до стану молекулярної гідродинаміки

Nonequilibrium statistical operator in the generalized molecular hydrodynamics of liquids

B.B. Markiv, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk

Abstract. An important role of the nonequilibrium statistical operator method of D.N. Zubarev in the generalized molecular hydrodynamics of liquids is discussed. Using this method one can develope a consistent generalized collective excitation approach for ionic, polar, magnetic and other liquids. Nonequilibrium statistical operator and appropriate transport equations for the system which relax to the state of molecular hydrodynamics are obtained. алу буде надіслано цю роботу.

Подається в Теоретическая и математическая физика
Submitted to Theoretical and Mathematical Physics

1. Вступ

Важливим досягненням сучасної нерівноважної теорії рідин є результати теорії молекулярної гідродинаміки [1–12]. На її основі досліджувалися колективні моди, часові кореляційні функції, узагальнені коефіцієнти переносу для моделі Ленарда-Джонса простих рідин [1, 2, 8, 12]. Методом нерівноважного статистичного оператора Д.Зубарєва [13–16] та методом проекційних операторів [17] була побудована узагальнена молекулярна гідродинаміка на основі розширення параметрів скороченого опису, що лежать в основі узагальненого підходу колективних збуджень [12, 18–20]. На відміну від методу проекційних операторів, в методі нерівноважного статистичного оператора проекційні оператори виникають природним чином як наслідок виключення похідних за часом від термодинамічних параметрів, спряжених середнім значенням параметрів скороченого опису. Такий підхід показав, що, крім відомих гідродинамічних мод, існують „кінетичні“ моди, які дають суттєвий вклад в області проміжних значень хвильових векторів та частот для колективних збуджень. Він також дав можливість дослідити спектр колективних збуджень, часові кореляційні функції та узагальнені коефіцієнти переносу для магнітних [21–26], полярних [27–32], іонних [16, 33–35] рідин, напівквантового гелію [36, 37], бінарних сумішей [39–41], металічних сплавів [42–47]. Узагальнений опис кінетичних та гідродинамічних процесів в теорії густих газів та рідин був запропонований в роботах [48–50]. Дослідження в цьому підході в основному розвивалися стосовно узагальнених кінетичних рівнянь для густих газів, плазми [51–54], а перехід до стану молекулярної гідродинаміки аналізувався для простих рідин у [50] та для квантових бозе-систем у [55].

2. Нерівноважний статистичний оператор і рівняння узагальненої гідродинаміки

В основі молекулярної гідродинаміки просторово однорідних простих рідин лежать рівняння переносу для середніх $\langle\tilde{a}_{\vec{k}}\rangle^t = (\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^t, \langle\hat{\vec{j}}_{\vec{k}}\rangle^t, \langle\hat{h}_{\vec{k}}\rangle^t)$, де $\hat{n}_{\vec{k}} = \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j}$, $\hat{\vec{j}}_{\vec{k}} = \sum_{j=1}^{N} \vec{p}_j e^{-i\vec{k}\vec{r}_j}$, $\hat{h}_{\vec{k}} = \hat{E}_{\vec{k}} - \langle\hat{E}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}\hat{n}_{\vec{k}}$ — Фур'є-компоненти густини числа частинок, густини імпульсу та густини узагальненої ентальпії відповідно [1, 10, 11], $\hat{E}_{\vec{k}} = \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{l\neq j=1}^{N}\Phi(r_{lj})\right)e^{-i\vec{k}\vec{r}_j}$ — Фур'є-компоненти густини повної енергії, де $\Phi(r_{lj})$ — парний потенціал взаємодії частинок масою m, повне число яких N з координатами фазового простору ($\vec{p}_j, \vec{r}_j$) — радіус-вектори імпульсу та просторової координати, r_{lj} — відстань між частинками, $\vec{k}$ — хвильовий вектор. Такі рівняння переносу мають наступну структуру [1, 10, 11]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle \hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t - \sum_m i\Omega^H_{lm}(\vec{k})\langle \hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t + \sum_m \int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi^H_{lm}(\vec{k},t,t')\langle \hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^{t'} dt' = 0, \tag{1}$$

де введено такі позначення: $l = 1,2,3$, $\hat{a}_{1,\vec{k}} = \hat{n}_{\vec{k}}$, $\hat{a}_{2,\vec{k}} = \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}$, $\hat{a}_{3,\vec{k}} = \hat{h}_{\vec{k}}$. У цьому рівнянні $i\Omega^H_{ml}(\vec{k}) = \sum_{l'}\langle \dot{\hat{a}}_{m,\vec{k}}\hat{a}_{l',-\vec{k}}\rangle_0 \tilde{\Phi}^{-1}_{l'l}(\vec{k})$ є елементами матриці

$$i\tilde{\Omega}^H(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & i\Omega_{nj} & 0 \\ i\Omega_{jn} & 0 & i\Omega_{jh} \\ 0 & i\Omega_{hj} & 0 \end{pmatrix}_{(\vec{k})}, \tag{2}$$

що описують недисипативні процеси і являють собою нормовані рівноважні кореляційні функції

$$i\Omega_{nj}(\vec{k}) = \langle \dot{\hat{n}}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} \cdot \hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{3}$$

$$i\Omega_{jn}(\vec{k}) = \langle \dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle \hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{4}$$

$$i\Omega_{hj}(\vec{k}) = \langle \dot{\hat{h}}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} \cdot \hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{5}$$

$$i\Omega_{jh}(\vec{k}) = \langle \dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle \hat{h}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{6}$$

$\tilde{\Phi}^{-1}_{ll'}(\vec{k})$ — елементи матриці, оберненої до матриці $\tilde{\Phi}(\vec{k})$:

$$\tilde{\Phi}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \langle \hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} \cdot \hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle \hat{h}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0 \end{pmatrix}, \tag{7}$$

структура якої вказує на ортогональність змінних $\hat{n}_{\vec{k}}$, $\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}$, $\hat{h}_{\vec{k}}$ в розумінні середніх $\langle \hat{n}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 = 0$, $\langle \hat{n}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0 = 0$, $\langle \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0 = 0$. Причому, $\langle \hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 = S_2(\vec{k})$ — статичний структурний фактор атомів простої рідини, де $\langle ...\rangle_0 = \int d\Gamma_N ... \varrho_0(x^N)$ — усереднення виконується з рівноважним статистичним оператором $\varrho_0(x^N) = Z^{-1}\exp(-\beta(H-\mu N))$, $Z = \int d\Gamma_N \exp(-\beta(H-\mu N))$ — велика статистична сума, $\beta = 1/k_{\text{Б}}T$, $k_{\text{Б}}$ — постійна Больцмана, T — рівноважне значення температури,

μ — хімічний потенціал, $H = \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{l\neq j=1}^{N}\Phi(r_{lj})\right)$ — гамільтоніан атомів простої рідини. Дисипативні процеси у рівняннях молекулярної гідродинаміки (1) описуються ядрами переносу

$$\varphi^H_{lm}(\vec{k};t,t') = \sum_{l'}\langle I^H_l(\vec{k})T^H_0(t,t')I^H_{l'}(-\vec{k})\rangle_0 \tilde{\Phi}^{-1}_{l'm}(\vec{k}), \tag{8}$$

що є елементами матриці функцій пам'яті:

$$\tilde{\varphi}^H(\vec{k};t,t') = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varphi^H_{jj} & \varphi^H_{jh} \\ 0 & \varphi^H_{hj} & \varphi^H_{hh} \end{pmatrix}_{(\vec{k};t,t')}, \tag{9}$$

де

$$I^H_j(\vec{k}) = (1-P_H)iL_N\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} = -i\vec{k} : \hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}}, \tag{10}$$
$$I^H_h(\vec{k}) = (1-P_H)iL_N\hat{h}_{\vec{k}} = -i\vec{k}\cdot\hat{\vec{q}}_{\vec{k}}$$

— узагальнені потоки, пов'язані відповідно з $\hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}}$, $\hat{\vec{q}}_{\vec{k}}$ — Фур'є-компонентами узагальнених тензора в'язкості та потоку ентальпії, $iL_N = \sum_{j=1}^{N}\frac{\vec{p}_j}{m}\frac{\partial}{\partial\vec{r}_j} - \frac{1}{2}\sum_{l\neq j=1}^{N}\frac{\partial}{\partial\vec{r}_j}\Phi(r_{lj})(\frac{\partial}{\partial\vec{p}_j} - \frac{\partial}{\partial\vec{p}_l})$ - оператор Ліувілля, що відповідає гамільтоніану H системи, P_H — проекційний оператор Морі, побудований на гідродинамічних ортогональних змінних $\hat{n}_{\vec{k}}$, $\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}$, $\hat{h}_{\vec{k}}$. $T^H_0(t,t') = \exp((t'-t)(1-P_H)iL_N)$ — оператор еволюції з врахуванням проектування Морі на простір ортогональних динамічних змінних $\hat{n}_{\vec{k}}$, $\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}$, $\hat{h}_{\vec{k}}$ [1, 11, 15]. У (9) враховано, що $I^H_n(\vec{k}) = (1-P_H)iL_N\hat{n}_{\vec{k}} = 0$. Ядра переносу матриці (9) в представленні Лапласа ($A(z) = i\int_0^\infty dt\exp(izt)A(t)$, $z = \omega + i\varepsilon$, $\varepsilon \to +0$) визначають узагальнені коефіцієнти в'язкості $\eta(\vec{k},z)$, теплопровідності $\lambda(\vec{k},z)$ і перехресні коефіцієнти переносу $\xi(\vec{k},z)$ [5, 6, 10, 11]:

$$\varphi^H_{jj}(\vec{k},z) = ik^2\eta(\vec{k},z)\frac{\beta}{mn},$$
$$\varphi^H_{hh}(\vec{k},z) = ik^2\lambda(\vec{k},z)\frac{k_B\beta^2}{c_v(\vec{k})}, \tag{11}$$
$$\varphi^H_{jh}(\vec{k},z) = ik^2\xi(\vec{k},z)\frac{k_B\beta^2}{c_v(\vec{k})},$$

$c_v(\vec{k})$ — узагальнена теплоємність простих рідин. Рівняння молекулярної гідродинаміки (1) також визначають часові кореляційні функції гідродинамічних змінних $\hat{n}_{\vec{k}}$, $\hat{\vec{j}}_{\vec{k}}$, $\hat{h}_{\vec{k}}$ [10, 11]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Phi}^H(\vec{k};t) - i\tilde{\Omega}^H(\vec{k})\tilde{\Phi}^H(\vec{k};t) + \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\tilde{\varphi}^H(\vec{k},t,t')\tilde{\Phi}^H(\vec{k};t')dt' = 0, \tag{12}$$

де

$$\tilde{\Phi}(\vec{k};t) = \begin{pmatrix} \Phi_{nn} & \Phi_{nj} & \Phi_{nh} \\ \Phi_{jn} & \Phi_{jj} & \Phi_{jh} \\ \Phi_{hn} & \Phi_{hj} & \Phi_{hh} \end{pmatrix}_{(\vec{k};t)},$$

— матриця часових кореляційних функцій $\Phi_{lm}(\vec{k};t) = \langle \hat{a}_{l,\vec{k}}(t)\hat{a}_{m,-\vec{k}}(0)\rangle_0$ гідродинамічних змінних. В методі нерівноважного статистичного оператора Д.М. Зубарєва рівняння молекулярної гідродинаміки (1) отримано за допомогою нерівноважного статистичного оператора [10, 11]:

$$\varrho^H(x^N;t) = \Bigg(1 + \sum_{l,m}\sum_{\vec{k}} \Big(\hat{a}_{l,-\vec{k}}\tilde{\Phi}^{-1}_{lm}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t - \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T_0^H(t,t')I_l^H(-\vec{k})\tilde{\Phi}^{-1}_{lm}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^{t'}dt'\Big)\Bigg)\varrho_0(x^N). \tag{13}$$

Тобто, **стану молекулярної гідродинаміки простої рідини відповідає нерівноважний статистичний оператор (13)**. Він є функцією розширеного набору динамічних змінних $\hat{n}_{\vec{k}}$, $\hat{\vec{j}}_{\vec{k}}$, $\hat{h}_{\vec{k}}$ та узагальнених потоків $I_n^H(\vec{k}) = 0$, $I_j^H(\vec{k})$, $I_h^H(\vec{k})$, які визначають узагальнені коефіцієнти переносу (9). Набір змінних $\hat{a}_{l,\vec{k}}$, $I_l^H(\vec{k})$ став основою побудови узагальнених рівнянь гідродинаміки для простих рідин [8, 12, 17–20], бінарних сумішей [18, 38, 39], іонних рідин [16, 33–35], напівквантового гелію [36, 37], квантових бозе-систем [56–58] в методі функцій Гріна [9] та ін. Такий підхід дав можливість в єдиній схемі проводити дослідження часових кореляційних функцій „густина-густина“(динамічного структурного фактора), „потік-потік“, „енергія-енергія“, їх перехресних кореляційних функцій, а також узагальнених коефіцієнтів переносу (11), включаючи спектр

кінетичних і гідродинамічних мод. Такому розширеному опису гідродинамічного стану системи теж відповідає нерівноважний статистичний оператор, побудований для простих рідин, іонних систем та ін. [16, 59–61].

Для простої рідини нерівноважний статистичний оператор узагальненої гідродинаміки має наступну структуру, подібну до (13):

$$\varrho^{GH}(x^N;t) = \Bigg(1 + \sum_{l,m}\sum_{\vec{k}} \Big(\hat{Y}_{l,-\vec{k}}(\tilde{\Phi}^G)^{-1}_{lm}(\vec{k})\langle\hat{Y}_{m,\vec{k}}\rangle^t - \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T_0^{GH}(t,t')I_l^{GH}(-\vec{k})(\tilde{\Phi}^G)^{-1}_{lm}(\vec{k})\langle\hat{Y}_{m,\vec{k}}\rangle^{t'}dt'\Big)\Bigg)\varrho_0(x^N), \tag{14}$$

де $\hat{Y}_{l,\vec{k}} = \{\hat{a}_{l,\vec{k}}, \hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}}, \hat{\vec{q}}_{\vec{k}}\}$ — розширений набір динамичних змінних, які є ортогональними, утворюючи діагональну матрицю рівноважних кореляційних функцій

$$\tilde{\Phi}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle\hat{\vec{j}}_{\vec{k}}\cdot\hat{\vec{j}}_{-\vec{k}}\rangle_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle\hat{h}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle\hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}}:\hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{-\vec{k}}\rangle_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \langle\hat{\vec{q}}_{\vec{k}}\cdot\hat{\vec{q}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

$(\tilde{\Phi}^G)^{-1}_{lm}(\vec{k})$ — елементи матриці $(\tilde{\Phi}^G)^{-1}(\vec{k})$ — оберненої до матриці $(\tilde{\Phi}^G)(\vec{k})$. $I_l^{GH}(\vec{k}) = \{I_\pi^{GH}(\vec{k}) = (1-P_{GH})iL_N\hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}}, I_q^{GH}(\vec{k}) = (1-P_{GH})iL_N\hat{\vec{q}}_{\vec{k}}\}$ — узагальнені потоки, в структуру яких входить проекційний оператор Морі розширеного набору динамічних змінних $P_{GH}\hat{A} = \sum_{lm}\langle\hat{A}\hat{Y}_{l,-\vec{k}}\rangle_0(\tilde{\Phi}^G)^{-1}_{lm}(\vec{k})\hat{Y}_{m,\vec{k}}$, з властивостями: $P_{GH}P_{GH} = P_{GH}$, $P_{GH}(1-P_{GH}) = 0$, $P_{GH}\hat{Y}_{l,\vec{k}} = \hat{Y}_{l,\vec{k}}$. $T_0^{GH}(t,t')$ — оператор еволюції з проекційним оператором P_{GH}. З допомогою нерівноважного проекційного оператора (14) отримуються рівняння узагальненої гідродинаміки для простих рідин наступної структури:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{Y}_{l,\vec{k}}\rangle^t - \sum_m i\Omega^{GH}_{lm}(\vec{k})\langle\hat{Y}_{m,\vec{k}}\rangle^t + \sum_m \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi^{GH}_{lm}(\vec{k},t,t')\langle\hat{Y}_{m,\vec{k}}\rangle^{t'}dt' = 0, \tag{16}$$

де $i\Omega^{GH}_{lm}(\vec{k})$ — елементи матриці

$$i\tilde{\Omega}^{GH}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & i\Omega_{nj} & 0 & 0 & 0 \\ i\Omega_{jn} & 0 & i\Omega_{jh} & i\Omega_{j\pi} & 0 \\ 0 & i\Omega_{hj} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\Omega_{\pi j} & 0 & 0 & i\Omega_{\pi q} \\ 0 & 0 & 0 & i\Omega_{q\pi} & 0 \end{pmatrix}_{(\vec{k})}, \tag{17}$$

в структуру якої входять нормовані рівноважні кореляційні функції (3)-(6) і нові нормовані рівноважні кореляційні функції

$$i\Omega_{\pi j}(\vec{k}) = \langle \hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}} : \hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} \cdot \hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1},$$

$$i\Omega_{\pi q}(\vec{k}) = \langle \hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}} : \hat{\vec{q}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle \hat{\vec{q}}_{\vec{k}} \cdot \hat{\vec{q}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}.$$

$\tilde{\varphi}^{GH}(\vec{k},t,t')$ узагальнені ядра переносу, які описують дисипативні процеси і утворюють матрицю функцій пам'яті узагальненої гідродинаміки простої рідини:

$$\tilde{\varphi}^{GH}(\vec{k},t,t') = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varphi_{\pi\pi} & \varphi_{\pi q} \\ 0 & 0 & 0 & \varphi_{q\pi} & \varphi_{qq} \end{pmatrix}_{(\vec{k},t,t')}. \tag{18}$$

$\tilde{\varphi}^{GH}(\vec{k},t,t')$ мають структуру аналогічну до (8), але побудовані на узагальнених потоках $I^{GH}_{\pi}(\vec{k})$, $I^{GH}_{q}(\vec{k})$ з оператором еволюції $T^{GH}_0(t,t')$. Рівняння узагальненої гідродинаміки як і рівняння молекулярної гідродинаміки (1) визначають відповідні часові кореляційні функції розширеного набору динамічних змінних $\hat{Y}_{l,\vec{k}}(t)$:

$$\tilde{\Phi}^{GH}(\vec{k},t) = \begin{pmatrix} \Phi_{nn} & \Phi_{nj} & \Phi_{nh} & \Phi_{n\pi} & \Phi_{nq} \\ \Phi_{jn} & \Phi_{jj} & \Phi_{jh} & \Phi_{j\pi} & \Phi_{jq} \\ \Phi_{hn} & \Phi_{hj} & \Phi_{hh} & \Phi_{h\pi} & \Phi_{hq} \\ \Phi_{\pi n} & \Phi_{\pi j} & \Phi_{\pi h} & \Phi_{\pi\pi} & \Phi_{\pi q} \\ \Phi_{qn} & \Phi_{qj} & \Phi_{qh} & \Phi_{q\pi} & \Phi_{qq} \end{pmatrix}_{(\vec{k},t)}, \tag{19}$$

причому, часові кореляційні функції $\Phi_{\pi\pi}(\vec{k},t)$, $\Phi_{\pi q}(\vec{k},t)$, $\Phi_{q\pi}(\vec{k},t)$, $\Phi_{qq}(\vec{k},t)$ можуть бути пов'язаними з узагальненими коефіцієнтами

(11). Тобто, система рівнянь

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Phi}^{GH}(\vec{k},t) - i\tilde{\Omega}^{GH}(\vec{k})\tilde{\Phi}^{GH}(\vec{k},t) + \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\tilde{\varphi}^{GH}(\vec{k},t,t')\tilde{\Phi}^{GH}(\vec{k},t')dt' = 0 \tag{20}$$

дає можливість в єдиній схемі досліджувати часові кореляційні функції гідродинамічних змінних $\hat{a}_{l,\vec{k}}$, а також узагальнені коефіцієнти переносу через кореляційні функції матриці $i\tilde{\Omega}^{GH}(\vec{k})$ (17) і узагальнені ядра переносу матриці $\tilde{\varphi}^{GH}(\vec{k};t,t')$ (18). Причому в марківському наближенні у часі в рівнянні (20), в гідродинамічній границі із $det|i\tilde{\Omega}^{GH}(\vec{k}) - \tilde{\Phi}^{GH}(\vec{k})| = 0$ знаходиться спектр колективних збуджень, який включає теплову моду $z_H(k) = D_T k^2 + O(k^4)$, дві комплексно-спряжені звукові моди $z_H(k) = \pm i\omega_s(k) + z_s(k)$, де $\omega_s(k) = ck + O(k^3)$ — частота поширення звуку, $z_s(k)$ — частота затухання звуку з коефіцієнтом затухання Γ. Окрім гідродинамічних мод, існують дві кінетичні моди: $z_\pi(k) = \varphi_{\pi\pi}(0) + O(k^2)$, $z_q(k) = \varphi_{qq}(0) + O(k^2)$, котрі в границі $k \to 0$ не зникають. Тут

$$D_T = \frac{v_T q^2}{\gamma\varphi_{qq}(0)} = \frac{\lambda}{mnc_p}, \qquad v_T q^2 = \frac{m\Phi_{qq} - h^2}{nc_v},$$

D_T — коефіцієнт термодифузії, $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$, c_p, c_v — відповідно термодинамічні значення теплоємностей при сталих тиску і об'ємі, λ — коефіцієнт теплопровідності, h — термодинамічне значення ентальпії, $c = \frac{\gamma}{mnS_2(k=0)}$ — адіабатична швидкість звуку, $S_2(k=0)$ — статичний структурний фактор при $k = 0$,

$$\Gamma = \frac{1}{2}(\gamma - 1)D_T + \frac{1}{2}\eta'',$$

де

$$\eta'' = \frac{v^2_{p\pi}}{\varphi_{\pi\pi}(0)} = \frac{(\frac{3}{4}\eta + \kappa)}{nm},$$

$$v^2_{p\pi} = \frac{mS_2(0)\Phi_{\pi\pi}(0) - \gamma}{mnS_2(0)},$$

η, κ — коефіцієнти зсувної і об'ємної в'язкості. Як бачимо, D_T, η'' визначаються ядрами переносу $\phi_{qq}(0)$, $\phi_{\pi\pi}(0)$ и кореляційними функціями Φ_{qq}, $\Phi_{\pi\pi}$ у відповідних наближеннях. Теплова і дві звукові моди співпадають з колективними збудженнями молекулярної гідродинаміки на базі рівнянь (1), однак коефіцієнти термодифузії і в'язкості визначаються функціями пам'яті вищого порядку ϕ_{qq}, $\phi_{\pi\pi}$. Важливо відзначити, що стану молекулярної гідродинаміки простої рідини відповідає нерівноважний статистичний оператор (13) або при розширеному описі — (14). З одного боку, нерівноважний статистичний оператор дає можливість отримати відповідні рівняння переносу для середніх значень параметрів скорченого опису, а з другого, — узгодити їх з співвідношеннями нерівноважної термодинаміки, визначивши ентропію стану.

Цікавим питанням є релаксація нерівноважного стану системи взаємодіючих частинок до стану молекулярної гідродинаміки. Дану задачу розглянемо у наближенні Маркова для функцій пам'яті (7):

$$\varphi^H_{ml}(\vec{k};t,t') = \varphi^H_{ml}(\vec{k})\delta(t-t'). \tag{21}$$

Тоді рівняння переносу (1) набувають вигляду

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t - \sum_m \Sigma^H_{lm}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t = 0, \tag{22}$$

де

$$\Sigma^H_{ml}(\vec{k}) = i\Omega^H_{ml}(\vec{k}) - \varphi^H_{ml}(\vec{k}), \tag{23}$$

$$\varphi^H_{ml}(\vec{k}) = \int\limits_0^\infty \varphi^H_{ml}(\vec{k};t)dt. \tag{24}$$

У представленні Лапласа за часом рівняння (22) мають вигляд

$$z\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle_z - \sum_m \Sigma^H_{lm}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle_z = -\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}(t=0)\rangle, \tag{25}$$

звідси можна отримати Лаплас-зображення для параметрів скороченого опису $\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle_z$:

$$\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle_z = -\sum_m [zI - \Sigma^H(\vec{k})]^{-1}_{lm}\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}(t=0)\rangle. \tag{26}$$

Цьому нерівноважному стану системи відповідає нерівноважний статистичний оператор узагальненої молекулярної гідродинаміки у наближенні Маркова:

$$\varrho^H(x^N;t) = \varrho_0(x^N)\{1+\sum_{l,m}\sum_{\vec{k}}\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t\tilde{\Phi}^{-1}_{lm}(\vec{k})(\hat{a}_{m,-\vec{k}} - I^H_m(-\vec{k};t))\}, \tag{27}$$

де

$$I^H_l(\vec{k};t) = \int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T^H_0(t,t')I^H_l(\vec{k})dt', \tag{28}$$

Тут слід відзначити важливу особливість, що позначення (28) є символічним, оскільки, границя $\varepsilon \to +0$ виконується після термодинамічної границі $N\to\infty$, $V\to\infty$, $N/V = const$ при виконанні відповідних усереднень з нерівноважним статистичним оператором (27) при отриманні рівнянь переносу (1), чи в марківскому наближенні (22).

Тепер поставимо задачу знаходження нерівноважного статистичного оператора з рівняння Ліувілля. Використавши метод нерівноважного статистичного оператора [13–15] і граничну умову, що $\varrho(x^N;t)$ при $t=t_0$ дорівнює $\varrho^H(x^N;t_0)$, отримаємо нерівноважний статистичний оператор системи, нерівноважний стан якої релаксує до стану молекулярної гідродинаміки:

$$\begin{aligned}\varrho(x^N;t) &= \varrho^H(x^N;t)\\ &- \int\limits_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T_q(t,t')(1-P_q(t'))iL_N\varrho^H(x^N;t')dt',\end{aligned} \tag{29}$$

в якому проекційний оператор Кавасакі-Гантона має наступну структуру:

$$\begin{aligned}P_q\varrho'(x^N;t) &= \left(\varrho^H(x^N;t) - \sum_l \frac{\delta\varrho^H(x^N;t)}{\delta\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t}\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t\right)\int\varrho'(x^N;t)d\Gamma_N\\ &+ \sum_l \frac{\delta\varrho^H(x^N;t)}{\delta\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t}\int\hat{a}_{l,\vec{k}}\varrho'(x^N;t)d\Gamma_N.\end{aligned} \tag{30}$$

$T_q(t,t')$ - оператор еволюції, але з проекційним оператором (30). Далі, розкриваючи дію оператора (30) і оператора Ліувілля на $\varrho^H(x^N;t')$, отримаємо:

$$\begin{aligned}&(1-P_q(t))\,iL_N\varrho^H(x^N;t)\\ &\quad= \varrho_0(x^N)\sum_{l,m}\sum_{\vec{k}}\left(1-\bar{P}_H(t)\right)(\dot{\hat{a}}_{l,-\vec{k}} - \delta\dot{I}^H_l(-\vec{k};t))\tilde{\Phi}^{-1}_{lm}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t,\end{aligned} \tag{31}$$

де $\dot{\hat{a}}_{m,\vec{k}} = iL_N\hat{a}_{m,\vec{k}}$, $\dot{I}^H_m(\vec{k};t) = iL_N I^H_m(\vec{k};t)$,

$$\bar{P}_H(t)\ldots = \sum_{l,m}\langle\ldots\hat{a}_{l,-\vec{k}}\rangle_0\tilde{\Phi}^{-1}_{lm}(\vec{k})(\hat{a}_{m,\vec{k}} - I^H_m(\vec{k};t)) \tag{32}$$

— „проекційний“ оператор, $\delta\dot{I}_l^H(\vec{k};t) = \dot{I}_l^H(\vec{k};t) - \langle\dot{I}_l^H(\vec{k};t)\rangle_0$ з врахуванням $\langle\dot{\hat{a}}_{m,\vec{k}}\rangle_0 = 0$. Враховуючи вираз (31), нерівноважний статистичний оператор (29) можна записати у вигляді:

$$\varrho(x^N;t) = \Bigg(1 + \sum_{l,m}\sum_{\vec{k}}\Big(\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t\tilde{\Phi}_{lm}^{-1}(\vec{k})(\hat{a}_{m,-\vec{k}} - I_m^H(-\vec{k};t))$$
$$- \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T_q(t,t')\left(1-\bar{P}_H(t')\right)$$
$$\times(\dot{\hat{a}}_{l,-\vec{k}} - \delta\dot{I}_l^H(-\vec{k};t'))\tilde{\Phi}_{lm}^{-1}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^{t'}dt'\Big)\Bigg)\varrho_0(x^N). \tag{33}$$

Він є функцією гідродинамічних змінних $\hat{a}_{m,\vec{k}}$ і їх узагальнених потоків $I_m^H(\vec{k};t)$ як і нерівноважний статистичний оператор молекулярної гідродинаміки (13), а також дії на них оператора Ліувілля: $\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}$, $\delta\dot{I}_l^H(\vec{k};t')$ з оператором еволюції в часі $T_q(t,t')$. З допомогою цього нерівноважного статистичного оператора, використовуючи співвідношення

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t = \langle\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}\rangle^t$$

можна отримати узагальнені рівняння переносу

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t = \langle\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}\rangle^t_H - \sum_m\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{lm}(\vec{k};t,t')\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^{t'}dt' \tag{34}$$

з функціями пам'яті

$$\varphi_{lm}(\vec{k};t,t') \tag{35}$$
$$= \sum_{m'}\langle\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}T_q(t,t')(1-\bar{P}_H(t'))(\dot{\hat{a}}_{m',-\vec{k}} - \delta\dot{I}_{m'}^H(-\vec{k};t'))\rangle_0\tilde{\Phi}_{m'm}^{-1}(\vec{k})$$

і

$$\langle\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}\rangle^t_H = \sum_m i\Omega_{lm}^H(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t - \sum_m\varphi_{lm}^H(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t$$
$$+ \sum_{m,m'} i\Omega_{lm'}^H(\vec{k})D_{m'm}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t, \tag{36}$$

де $D_{m'm}(\vec{k}) = \sum_{l'}\langle\dot{\hat{a}}_{m',\vec{k}}I_{l'}^H(-\vec{k};t')\rangle_0\tilde{\Phi}_{l'm}^{-1}(\vec{k})$. Як можна побачити зі структури рівняння (34), першим доданком у правій частині є вклад

молекулярної гідродинаміки, для якого добре вивчені колективні збудження. Функції пам'яті (35) мають складну структуру. Розкриваючи дію оператора $(1-\bar{P}_H(t))$ на $\dot{\hat{a}}_{m,\vec{k}}$ і $\delta\dot{I}_m^H(\vec{k};t')$), приходимо до

$$(1-\bar{P}_H(t))\dot{\hat{a}}_{m,\vec{k}} = \dot{\hat{a}}_{m,\vec{k}} - \sum_{m'} i\Omega_{mm'}^H(\vec{k})(\hat{a}_{m',\vec{k}} - I_{m'}^H(\vec{k};t)) \tag{37}$$

$$(1-\bar{P}_H(t))\delta\dot{I}_m^H(\vec{k};t) = \dot{I}_m^H(\vec{k};t) - \langle\dot{I}_m^H(\vec{k};t)\rangle_0$$
$$+ \sum_{m'}\varphi_{mm'}^H(\vec{k})(\hat{a}_{m',\vec{k}} - I_{m'}^H(\vec{k};t)), \tag{38}$$

для $\varphi_{lm}(t,t')$ отримуємо:

$$\varphi_{lm}(\vec{k};t,t')$$
$$= \sum_{m'}\left(\langle\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}T_q(t,t')\dot{\hat{a}}_{m',-\vec{k}}\rangle_0 - \langle\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}T_q(t,t')\dot{I}_{m'}^H(-\vec{k};t')\rangle_0\right)\tilde{\Phi}_{m'm}^{-1}(\vec{k})$$
$$- \sum_{m',l'}\left(\langle\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}T_q(t,t')\hat{a}_{m',-\vec{k}}\rangle_0 - \langle\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}T_q(t,t')I_{m'}^H(-\vec{k};t')\rangle_0\right)$$
$$\times\left(i\Omega_{m'l'}^H(\vec{k}) - \varphi_{m'l'}^H(\vec{k})\right)\tilde{\Phi}_{l'm}^{-1}(\vec{k}). \tag{39}$$

Рівняння переносу (34) за структурою функцій пам'яті $\varphi_{lm}(\vec{k};t,t')$, враховуючи $\varphi_{mm'}^H(\vec{k})$, $i\Omega_{mm'}^H(\vec{k})$, містять другий порядок за часовими кореляційними функціями. Разом із нерівноважним статистичним оператором вони можуть описувати нерівноважні процеси, пов'язані з релаксацією стану системи взаємодіючих частинок до стану молекулярної гідродинаміки. Важливим питанням є рівняння для часових кореляційних функцій, що відповідають системі рівнянь переносу (34). Відповідно до структури функцій пам'яті (39) ці рівняння повинні будуватися для розширеного набору динамічних змінних $\hat{Y}_{l,\vec{k}}$ як і у випадку нерівноважного статистичного оператора (14).

3. В'язко - еластичне наближення

У цьому підрозділі ми розглянемо в'язко - еластичне наближення для системи рівнянь (34), коли параметрами скороченого опису в рамках молекулярної гідродинаміки є середні значення $\{\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^t, \langle\hat{\vec{j}}_{\vec{k}}\rangle^t\}$. У такому випадку матриці $i\tilde{\Omega}^H(\vec{k})$, $\tilde{\varphi}^H(\vec{k})$ мають наступну структуру:

$$i\tilde{\Omega}^H(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & i\Omega^H_{nj}(\vec{k}) \\ i\Omega^H_{jn}(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}, \tag{40}$$

$$\tilde{\varphi}^H(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \varphi^H_{jj}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \tag{41}$$

і

$$\tilde{\Sigma}^H(\vec{k}) = \begin{pmatrix} 0 & i\Omega^H_{nj}(\vec{k}) \\ i\Omega^H_{jn}(\vec{k}) & -\varphi^H_{jj}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \tag{42}$$

тоді система рівнянь (34) запишеться у вигляді:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^t = \\
&+ i\Omega^H_{nj}(\vec{k})\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t + i\Omega^H_{nj}(\vec{k})\langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} I^H_j(-\vec{k};t)\rangle_0 \Phi^{-1}_{jj}(\vec{k})\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t \\
&- \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\Bigg(\Big[\langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\dot{\hat{n}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \Phi^{-1}_{nn}(\vec{k}) \\
&- \Big(\langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 - \langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t') I^H_j(-\vec{k};t')\rangle_0\Big) \\
&\times i\Omega^H_{jn}(\vec{k})\Phi^{-1}_{nn}(\vec{k})\Big]\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^{t'} \\
&+ \Big[\Big(\langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{-\vec{k}}\rangle_0 - \langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\dot{I}^H_j(-\vec{k};t')\Big)\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k}) \\
&- \langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 i\Omega^H_{nj}(\vec{k})\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k}) \\
&+ \Big(\langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 - \langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t') I^H_j(-\vec{k};t')\rangle_0\Big) \\
&\times \varphi^H_{jj}(\vec{k})\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k})\Big]\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^{t'}\Bigg)dt',
\end{aligned} \tag{43}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t = \\
&+ i\Omega^H_{jn}(\vec{k})\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^t - \varphi^H_{jj}(\vec{k})\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t \\
&+ i\Omega^H_{jn}(\vec{k})\langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} I^H_j(-\vec{k};t)\rangle_0 \Phi^{-1}_{jj}(\vec{k})\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t \\
&- \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\Bigg(\Big[\langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\dot{\hat{n}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \Phi^{-1}_{nn}(\vec{k}) \\
&- \Big(\langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 - \langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} T_q(t,t') I^H_j(-\vec{k};t')\rangle_0\Big) \\
&\times i\Omega^H_{jn}(\vec{k})\Phi^{-1}_{nn}(\vec{k})\Big]\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^{t'} \\
&+ \Big[\Big(\langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{-\vec{k}}\rangle_0 - \langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\dot{I}^H_j(-\vec{k};t')\Big)\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k}) \\
&- \langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 i\Omega^H_{nj}(\vec{k})\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k}) \\
&+ \Big(\langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 - \langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} T_q(t,t') I^H_j(-\vec{k};t')\rangle_0\Big) \\
&\times \varphi^H_{jj}(\vec{k})\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k})\Big]\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^{t'}\Bigg)dt'.
\end{aligned} \tag{44}$$

Важливо розкрити структуру даних рівнянь, беручи до уваги відомі значення $i\Omega^H_{nj}(\vec{k})$, $i\Omega^H_{jn}(\vec{k})$ та дію оператора Ліувілля на відповідні динамічні змінні:

$$\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} = -\frac{i\vec{k}}{m}\cdot\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}, \qquad \dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} = -i\vec{k} : \overleftrightarrow{T}_{\vec{k}}, \tag{45}$$

$\overleftrightarrow{T}_{\vec{k}}$ — Фур'є - компонента тензора в'язких напружень. Врахувавши (10) та (45), часові кореляційні функції у рівняннях (43), (44) можуть бути записані у вигляді:

$$\langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}} I^H_j(-\vec{k};t)\rangle_0 = \vec{k} : \langle\overleftrightarrow{T}_{\vec{k}}\,\hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{-\vec{k}}\rangle_0 : \vec{k} = \vec{k} : \varphi^H_{T\pi} : \vec{k}, \tag{46}$$

$$\begin{aligned}
\langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\dot{\hat{n}}_{-\vec{k}}\rangle_0 &= \frac{\vec{k}}{m}\cdot\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0\cdot\frac{\vec{k}}{m} \\
&= \frac{\vec{k}}{m}\cdot D^q(\vec{k};t,t')\cdot\frac{\vec{k}}{m} = \frac{k^2}{m^2}D^q(\vec{k};t,t'),
\end{aligned} \tag{47}$$

$\frac{1}{m^2}D^q(\vec{k};t,t')$ — Фур'є - компонента узагальненого коефіцієнта дифузії з оператором еволюції $T_q(t,t')$.

$$\langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 = -\frac{i\vec{k}}{m}\cdot D^q(\vec{k};t,t'),$$

$$\langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}} T_q(t,t') I^H_j(-\vec{k};t')\rangle_0 = i\vec{k}\cdot\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{-\vec{k}}\rangle_0 : \vec{k} = \vec{k}\cdot\varphi^q_{j\pi}(\vec{k};t,t') : \vec{k},$$

$$\varphi^q_{j\pi}(\vec{k};t,t') = \langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} T_q(t,t')\hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \tag{48}$$

Часові кореляційні функції типу $\varphi^q_{j\pi}(\vec{k};t,t')$ виникали при розширеному описі гідродинаміки [11,12,50] (19), однак із оператором еволюції e^{iL_Nt}. Часова кореляційна функція $\langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}}T_q(t,t')\dot{I}^H_j(-\vec{k};t')\rangle_0$ у (43) може бути представлена

$$\begin{aligned}\langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}}T_q(t,t')\dot{I}^H_j(-\vec{k};t')\rangle_0 &= -\langle\ddot{\hat{n}}_{\vec{k}}T_q(t,t')I^H_j(-\vec{k};t')\rangle_0\\ = \frac{i\vec{k}}{m}\cdot\langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}}T_q(t,t')I^H_j(-\vec{k};t')\rangle_0 &= \frac{i\vec{k}}{m}\cdot\left(\vec{k}:\varphi^q_{T\pi}(\vec{k};t,t'):\vec{k}\right).\end{aligned} \tag{49}$$

Тепер врахуємо, що

$$i\Omega_{nj}(\vec{k}) = \langle\dot{\hat{n}}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\cdot\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1} = -\frac{i\vec{k}}{m}, \tag{50}$$

$$\begin{aligned}i\Omega_{jn}(\vec{k}) &= \langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0\langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}\\ = -\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\dot{\hat{n}}_{-\vec{k}}\rangle_0\langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1} &= -\frac{i\vec{k}}{m}\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\cdot\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0\langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1},\end{aligned}$$

або

$$i\Omega_{jn}(\vec{k}) = -\frac{i\vec{k}n}{\beta}\frac{1}{S_2(\vec{k})}, \tag{51}$$

де $\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\cdot\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 = \frac{mn}{\beta}$, n — густина, $\beta = \frac{1}{k_BT}$, $S_2(\vec{k}) = \langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0$ рівноважний статичний структурний фактор. Тоді систему рівнянь (43), (44) представимо у вигляді:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^t =\\ &-\frac{i\vec{k}}{m}\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t - \left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1}\left(\vec{k}:\varphi^H_{T\pi}(\vec{k}):\vec{k}\right)\frac{i\vec{k}}{m}\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t\\ &-\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}\Bigg(\frac{\vec{k}}{m}\cdot D^q(\vec{k};t,t')\cdot\frac{\vec{k}}{m}\frac{1}{S_2(\vec{k})}\\ &-\left(\frac{i\vec{k}}{m}\cdot D^q(\vec{k};t,t') + \frac{\vec{k}}{m}\varphi^q_{j\pi}(\vec{k};t,t'):\vec{k}\right)\frac{i\vec{k}n}{\beta}\frac{1}{S_2^2(\vec{k})}\Bigg)\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^{t'}dt'\\ &-\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}\Bigg(\left[\frac{\vec{k}}{m}\cdot\varphi^q_{jT}(\vec{k};t,t'):\vec{k} - \frac{i\vec{k}}{m}\left(\vec{k}:\varphi^q_{T\pi}(\vec{k};t,t'):\vec{k}\right)\right]\\ &\times\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1} - \frac{\vec{k}}{m}\varphi^q_{jn}(\vec{k};t,t')\frac{\vec{k}}{m}\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1}\\ &+\left(-\frac{i\vec{k}}{m}\cdot D^q(\vec{k};t,t') - \frac{\vec{k}}{m}\varphi^q_{j\pi}(\vec{k};t,t'):\vec{k}\right)\\ &\times k^2\eta(\vec{k})\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1}\Bigg)\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^{t'}dt',\end{aligned} \tag{52}$$

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t =\\ &-\frac{i\vec{k}n}{\beta}\frac{1}{S_2(\vec{k})}\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^t - k^2\eta(\vec{k})\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t\\ &+\frac{\vec{k}}{m}\cdot\varphi^H_{j\pi}(\vec{k}):\vec{k}\frac{n}{\beta}\frac{1}{S_2(\vec{k})}\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1}\left(-i\vec{k}\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t\right)\\ &-\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}\Bigg(\vec{k}:\varphi^q_{Tj}(\vec{k};t,t')\frac{\vec{k}}{m}\\ &+\left[-i\vec{k}:\varphi^q_{Tj}(\vec{k};t,t') - \vec{k}:\varphi^q_{T\pi}(\vec{k};t,t'):\vec{k}\right]\frac{i\vec{k}n}{\beta}\frac{1}{S_2^2(\vec{k})}\Bigg)\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^{t'}dt'\\ &-\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}\Bigg(\left[\vec{k}:\varphi^q_{TT}(\vec{k};t,t'):\vec{k} - \vec{k}:\varphi^q_{T\dot{\pi}}(\vec{k};t,t'):\vec{k}\right]\\ &\times\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1} - D^q(\vec{k};t,t')\cdot\frac{\vec{k}}{m}\frac{\vec{k}}{m}\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1}\\ &+\left[-i\vec{k}:\varphi^q_{Tj}(\vec{k};t,t') - \vec{k}:\varphi^q_{T\pi}(\vec{k};t,t'):\vec{k}\right]\\ &\times k^2\eta(\vec{k})\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1}\Bigg)\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^{t'}dt'\end{aligned} \tag{53}$$

Із аналізу структури рівнянь (52), (53) важливо відзначити, що у них крім узагальненого коефіцієнта в’язкості, в’язко - дифузійних ядер переносу входить узагальнений коефіцієнт дифузії (47) атомів рідини. Крім того, рівняння (52), (53) містять другий порядок за ядрами переносу. Нерівноважний статистичний оператор (33) містить, крім динамічних змінних $\hat{a}_{m,-\vec{k}}$, також узагальнені потоки молекулярної гідродинаміки $I^H_m(-\vec{k};t)$, тому рівняння (52), (53) необхідно доповнити рівняннями для відповідних потоків.

Такі рівняння для узагальнених потоків знаходяться за допомогою нерівноважного статистичного оператора (33) і мають наступну структуру:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle I_l^H(\vec{k};t)\rangle^t = \langle \dot{I}_l^H(\vec{k};t)\rangle_H^t - \sum_m \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\psi_{lm}(\vec{k};t,t')\langle \hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^{t'}dt', \tag{54}$$

де $\psi_{lm}(\vec{k};t,t')$ — нові функції пам'яті:

$$\begin{aligned}
&\psi_{lm}(\vec{k};t,t')\\
&\quad=\sum_{m'}\Big(\langle \dot{I}_l^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\dot{\hat{a}}_{m',-\vec{k}}\rangle_0-\langle \dot{I}_l^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\dot{I}_{m'}^H(-\vec{k};t')\rangle_0\Big)\\
&\quad\times\tilde{\Phi}^{-1}_{m'm}(\vec{k})\\
&\quad-\sum_{m',l'}\Big(\langle \dot{I}_l^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\hat{a}_{m',-\vec{k}}\rangle_0-\langle \dot{I}_l^H(\vec{k};t)T_q(t,t')I_{m'}^H(-\vec{k};t')\rangle_0\Big)\\
&\quad\times\Big(i\Omega^H_{m'l'}(\vec{k})-\varphi^H_{m'l'}(\vec{k})\Big)\,\tilde{\Phi}^{-1}_{l'm}(\vec{k}),
\end{aligned}\tag{55}$$

а гідродинамічне середнє обчислюється за формулою

$$\begin{aligned}
\langle \dot{I}_l^H(\vec{k};t)\rangle_H^{t'}&=\langle \dot{I}_l^H(\vec{k};t)\rangle_0\\
&+\sum_{mm'}\langle \dot{I}_l^H(\vec{k};t)\hat{a}_{m,-\vec{k}}\rangle_0\Phi^{-1}_{mm'}(\vec{k})\langle \hat{a}_{m'}\rangle^{t'}\\
&+\sum_{mm'}\langle \dot{I}_l^H(\vec{k};t)I_m^H(-\vec{k};t')\rangle_0\Phi^{-1}_{mm'}(\vec{k})\langle \hat{a}_{m'}\rangle^{t'}.
\end{aligned}\tag{56}$$

Врахуємо, що $I_n^H(\vec{k})=0$, тому будемо розглядати тільки рівняння для $\langle I_j^H(\vec{k};t)\rangle^t$, яке набуде вигляду:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\langle I_j^H(\vec{k};t)\rangle^t=\\
&\quad+\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)\rangle_0+\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0\Phi^{-1}_{nn}(\vec{k})\langle \hat{n}_{\vec{k}}\rangle^t\\
&\quad+\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k})\langle \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t-\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)I_j^H(-\vec{k};t)\rangle_0\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k})\langle \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t\\
&\quad-\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}\Big(\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\dot{\hat{n}}_{-\vec{k}}\rangle_0\Phi^{-1}_{nn}(\vec{k})\\
&\quad-\Big(\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0-\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')I_j^H(-\vec{k};t')\rangle_0\Big)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\quad\times i\Omega_{jn}(\vec{k})\Phi^{-1}_{nn}(\vec{k})\Big)\langle \hat{n}_{\vec{k}}\rangle^{t'}dt'\\
&\quad-\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}\Big(\Big(\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{-\vec{k}}\rangle_0\\
&\quad-\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\dot{I}_j^H(-\vec{k};t')\rangle_0\Big)\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k})\\
&\quad-\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 i\Omega_{nj}(\vec{k})\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k})\\
&\quad+\Big(\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0-\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')I_j^H(-\vec{k};t')\rangle_0\Big)\\
&\quad\times\varphi^H_{jj}(\vec{k})\Phi^{-1}_{jj}(\vec{k})\Big)\langle \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^{t'}dt'.
\end{aligned}\tag{57}$$

Розкриємо кореляційні функції, що входять в рівняння:

$$\begin{aligned}
&\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0=-\langle I_j^H(\vec{k};t)\dot{\hat{n}}_{-\vec{k}}\rangle_0\\
&\quad=-\vec{k}:\langle \hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0\cdot\frac{\vec{k}}{m}=-\vec{k}:\varphi^H_{\pi j}(\vec{k};t)\cdot\frac{\vec{k}}{m};
\end{aligned}\tag{58}$$

$$\begin{aligned}
&\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0=-\langle I_j^H(\vec{k};t)\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{-\vec{k}}\rangle_0\\
&\quad=-\vec{k}:\langle \hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}}\overleftrightarrow{T}_{-\vec{k}}\rangle_0:\vec{k}=-\vec{k}:\varphi^H_{\pi T}(\vec{k};t):\vec{k};
\end{aligned}\tag{59}$$

$$\begin{aligned}
&\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)I_j^H(-\vec{k};t)\rangle_0\\
&\quad=\vec{k}:\langle \dot{\hat{\overleftrightarrow{\pi}}}_{\vec{k}}\hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{-\vec{k}}\rangle_0:\vec{k}=\vec{k}:\varphi^H_{\dot{\pi}\pi}(\vec{k};t):\vec{k};
\end{aligned}\tag{60}$$

$$\begin{aligned}
&\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\dot{\hat{n}}_{-\vec{k}}\rangle_0=-\langle I_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\ddot{\hat{n}}_{-\vec{k}}\rangle_0\\
&\quad=-\langle I_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{-\vec{k}}\rangle_0\cdot\frac{i\vec{k}}{m}=-\Big(\vec{k}:\langle \hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}}T_q(t,t')\overleftrightarrow{T}_{-\vec{k}}\rangle_0:\vec{k}\Big)\cdot\frac{i\vec{k}}{m}\\
&\quad=-\Big(\vec{k}:\varphi^q_{\pi T}(\vec{k};t,t'):\vec{k}\Big)\cdot\frac{i\vec{k}}{m};
\end{aligned}\tag{61}$$

$$\begin{aligned}
&\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0=-\langle I_j^H(\vec{k};t)T_q(t,t')\dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{-\vec{k}}\rangle_0\\
&\quad=-\vec{k}:\langle \hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}}T_q(t,t')\overleftrightarrow{T}_{-\vec{k}}\rangle_0:\vec{k}=-\vec{k}:\varphi^q_{\pi T}(\vec{k};t,t'):\vec{k};
\end{aligned}\tag{62}$$

$$
\begin{aligned}
&\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t) T_q(t,t') I_j^H(-\vec{k};t')\rangle_0 \\
&\quad = \vec{k} : \langle \dot{\hat{\overleftrightarrow{\pi}}}_{\vec{k}} T_q(t,t') \hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{-\vec{k}} \rangle_0 : \vec{k} = \vec{k} : \varphi^q_{\dot{\pi}\pi}(\vec{k};t,t') : \vec{k};
\end{aligned}
\tag{63}
$$

$$
\begin{aligned}
&\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t) T_q(t,t') \dot{\hat{\vec{\jmath}}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \\
&\quad = \vec{k} : \langle \dot{\hat{\overleftrightarrow{\pi}}}_{\vec{k}} T_q(t,t') \overleftrightarrow{T}_{-\vec{k}} \rangle_0 : \vec{k} = \vec{k} : \varphi^q_{\dot{\pi}T}(\vec{k};t,t') : \vec{k};
\end{aligned}
\tag{64}
$$

$$
\begin{aligned}
&\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t) T_q(t,t') \dot{I}_j^H(-\vec{k};t')\rangle_0 \\
&\quad = \vec{k} : \langle \dot{\hat{\overleftrightarrow{\pi}}}_{\vec{k}} T_q(t,t') \dot{\hat{\overleftrightarrow{\pi}}}_{-\vec{k}} \rangle_0 : \vec{k} = \vec{k} : \varphi^q_{\dot{\pi}\dot{\pi}}(\vec{k};t,t') : \vec{k};
\end{aligned}
\tag{65}
$$

$$
\begin{aligned}
&\langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t) T_q(t,t') \hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 = -\langle I_j^H(\vec{k};t) T_q(t,t') \dot{\hat{n}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \\
&\quad = -\vec{k} : \langle \hat{\overleftrightarrow{\pi}}_{\vec{k}} T_q(t,t') \hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}} \rangle_0 \cdot \frac{\vec{k}}{m} = -\vec{k} : \varphi^q_{\pi j}(\vec{k};t,t') \cdot \frac{\vec{k}}{m}.
\end{aligned}
\tag{66}
$$

Тепер рівняння для $\langle I_j^H(\vec{k};t)\rangle^t$ можна переписати у вигляді:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\langle I_j^H(\vec{k};t)\rangle^t = \\
&\quad + \langle \dot{I}_j^H(\vec{k};t)\rangle_0 - \vec{k} : \varphi^H_{\pi j}(\vec{k};t) \cdot \frac{\vec{k}}{m}\frac{1}{S_2(\vec{k})}\langle \hat{n}_{\vec{k}}\rangle^t \\
&\quad - \vec{k} : \varphi^H_{\pi T}(\vec{k};t) : \vec{k}\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1}\langle \hat{\jmath}_{\vec{k}}\rangle^t - \vec{k} : \varphi^H_{\dot{\pi}\pi}(\vec{k};t) : \vec{k}\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1}\langle \hat{\jmath}_{\vec{k}}\rangle^t \\
&\quad - \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\Bigg(-\left(\vec{k} : \varphi^q_{\pi T}(\vec{k};t,t') : \vec{k}\right) \cdot \frac{i\vec{k}}{m}\frac{1}{S_2(\vec{k})} \\
&\quad + \left(-\vec{k} : \varphi^q_{\pi T}(\vec{k};t,t') : \vec{k} - \vec{k} : \varphi^q_{\dot{\pi}\pi}(\vec{k};t,t') : \vec{k}\right) \\
&\quad \times \frac{i\vec{k}n}{\beta}\frac{1}{S_2^2(\vec{k})}\Bigg)\langle \hat{n}_{\vec{k}}\rangle^{t'} dt'
\end{aligned}
\tag{67}
$$

$$
\begin{aligned}
&- \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\Bigg(\left(\vec{k} : \varphi^q_{\dot{\pi}T}(\vec{k};t,t') : \vec{k} - \vec{k} : \varphi^q_{\dot{\pi}\dot{\pi}}(\vec{k};t,t') : \vec{k}\right)\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1} \\
&- \vec{k} : \varphi^q_{\pi j}(\vec{k};t,t') \cdot \frac{\vec{k}}{m}\frac{i\vec{k}}{m}\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1} \\
&+ \left(-\vec{k} : \varphi^q_{\pi T}(\vec{k};t,t') : \vec{k} - \vec{k} : \varphi^q_{\dot{\pi}\pi}(\vec{k};t,t') : \vec{k}\right) \\
&\times k^2\eta(\vec{k})\left(\frac{mn}{\beta}\right)^{-1}\Bigg)\langle \hat{\jmath}_{\vec{k}}\rangle^{t'} dt'.
\end{aligned}
$$

Рівняння (67) містить вищі функції пам'яті $\varphi^q_{\dot{\pi}\dot{\pi}}(\vec{k};t,t')$, $\varphi^q_{\dot{\pi}T}(\vec{k};t,t')$, $\varphi^q_{\dot{\pi}\pi}(\vec{k};t,t')$. Отримана система рівнянь (52),(53),(67) містить другий порядок за функціями пам'яті і описує нелінійні гідродинамічні флуктуації у в'язко - еластичному наближенні. Дана система рівнянь також містить вклад молекулярної гідродинаміки. Важливим питанням є дослідження часових кореляційних функцій на основі системи рівнянь (52),(53),(67), а також відповідних функцій пам'яті, що входять в дані рівняння переносу.

4. Висновки

Таким чином, в цій роботі ми виклали основні рівняння молекулярної гідродинаміки та їх узагальнення, які отримано з допомогою відповідних нерівноважних статистичних операторів у методі Д.М. Зубарєва. В цьому підході проекційні оператори Кавасакі-Гантона, Морі виникають природно, а явний вигляд нерівноважного статистичного оператора дає можливість узгодити основні рівняння переносу зі співвідношеннями нерівноважної термодинаміки. Важливим є той факт, що стану молекулярної гідродинаміки в методі Д.М.Зубарєва відповідає визначений нерівноважний статистичний оператор. На даний час характеристики (колективні збудження, часові кореляційні функції, коефіцієнти переносу) стану молекулярної гідродинаміки для рідин широко вивчені, що може слугувати основою виходу за рамки молекулярної гідродинаміки. Ми спробували коротко реалізувати такий підхід з допомогою методу нерівноважного статистичного оператора Д.М.Зубарєва, розглянувши релаксацію нерівноважного стану системи до стану молекулярної гідродинаміки з ядрами переносу в наближенні Маркова, яке для простої Леннард-Джонсівської рідини добре досліджено [1, 8, 19].

Література

1. Boon J., Yip S. Molecular Hydrodynamics. N.-Y., McGraw-Hill Inc., 1980.
2. Mountain R.D. Generalized Hydrodynamics. Adv. In Mol. Relaxation Process, 1976, V. 9, p. 225.
3. Под.ред С. Лавси и Т. Шпрингера. Динамические свойства твердых тел и жидкостей. Исследования методом расеяния нейтронов. Москва, Мир, 1980.
4. Резибуа П., де Ленер М. Классическая кинетическая теория жидкостей и газов. Москва, Мир, 1980.
5. Kadanoff L.P. Martin P.C. Hydrodynamic Equation and Correlation Functions. // Ann. Phys., 1963, V. 24, №1, p. 419-469.
6. Сергеев М.В. Обобщенные уравнения переноса в теории необратимых процессов. // ТМФ, 1974, Т. 21, №3, с. 402.
7. Тищенко С.В. Построение обобщенной гидродинамики методом статистического оператора. // ТМФ, 1976, Т. 26, №1, с. 96.
8. de Schepper I.M., Cohen E.G.D., Bruin C., van Rijs J.C., Montrooij W., de Graaf L.A. Hydrodynamic time correlation functions for a Lennard-Jones fluids. // Phys. Rev. A, 1988, V. 38, №1, p. 271.
9. Церковников Ю.Ф. Метод двухвременных функций Грина в молекулярной гидродинамике. // ТМФ, 1985, Т. 63, №3, с. 440.
10. Мриглод І.М., Токарчук М.В. До статистичної гідродинаміки простих рідин. Узагальнені коефіцієнти переносу. Препринт/АН УРСР, ІФКС-91-6У, Київ, 1991, 24 с.
11. Мрыглод И.М., Токарчук М.В. К статистической гидродинамике простых жидкостей. // Вопросы атомной науки и техники. 1992, Вып. 3(24), с. 134-139.
12. Mryglod I.M., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Generalized collective modes for the Lennard-Jones fluid. // Mol. Phys., 1995, V. 84, №2, p. 235.
13. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. Москва, Наука, 1971.
14. Зубарев Д.Н. Современные методы статистической теории неравновесных процессов. Итоги науки и техники. Современные проблемы математики. Москва, ВИНИТИ, 1980, Т. 157, с. 131.
15. Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Рёпке Г. Статистическая механика неравновесных процессов. Москва, Физматлит, 2002, Т. 2, 295 с.
16. Зубарев Д.Н., Токарчук М.В. Неравновесная статистическая гидродинамика ионных систем. // ТМФ, 1987, Т. 70, №2, с. 234.
17. Akcasu A.Z., Deniels E. Fluctuation analysis in simple fluids. // Phys. Rev. A, 1970, V. 2, №3, p. 962.

18. Мриглод І.М. Статистична теорія колективних збуджень у рідинах: підхід узагальнених колективних мод. Автореферат дисерт. на здоб. наук. ступеня док. фіз.-мат. наук. Львів, 2000, 32 с.
19. Omelyan I.P., Mryglod I.M. Generalized collective modes for the Lennard-Jones fluid. High mode approximation. // Condens. Matter Phys., 1994, №4, p. 128.
20. Mryglod I.M., Omelyan I.P. Generalized collective modes for the Lennard-Jones fluid in higher mode approximations. // Phys. Lett. A, 1995, V. 205, №4, p. 401.
21. Mryglod I.M., Tokarchuk M.V. Folk R. On the hydrodynamic theory of a magnetic liquid: I. General description. // Physica A, 1995, V. 220, №3/4, p. 325.
22. Mryglod I.M., Folk R. On the hydrodynamic theory of a magnetic liquid: II. Hydrodynamic mode in the Heisenberg liquid. // Physica A, 1996, V. 234, №1-2, p. 129.
23. Мрыглод И.М., Токарчук М.В. Статистическая гидродинамика магнитных жидкостей: I. Метод неравновесного статистического оператора. // ТМФ, 1998, Т. 115, №1, с. 132.
24. Мриглод І.М., Рудавський Ю.К., Токарчук М.В., Бацевич О.Ф. Статистична гідродинаміка суміші магнітних та немагнітних частинок. // Укр. фіз. журн., 1999, Т. 44, №8, с. 1030.
25. Мриглод І.М., Рудавський Ю.К., Токарчук М.В., Бацевич О.Ф. Статистична гідродинаміка суміші магнітних та немагнітних частинок: слабонерівноважні процеси. // Укр. фіз. журн., 1999, Т. 44, №9, с. 1174.
26. Mryglod I., Folk R., Dubyk S., Rudavskii Yu. Dynamic structure factors of a Heisenberg model ferrofluid. // Condens. Matter Phys., 1999, V. 2, №2(18), p. 221.
27. Omelyan I.P., Mryglod I.M., Tokarchuk M.V. Dielectric relaxation in dipolar fluid. Generalized mode approach // Condens. Matter Phys., 1998, V. 1, №4(13), p. 179.
28. Omelyan I.P., Mryglod I.M., Tokarchuk M.V. Generalized dipolar modes of a Stockmayer fluid in high-order approximations. // Phys. Rev. E, 1998, V. 57, №6, p. 6667.
29. Omelyan I.P., Zhelem R.I., Tokarchuk M.V. Generalized hydrodynamics of polar liquids in external inhomogeneous electric field. Method of nonequilibrium statistical operator. // Ukr. Fiz. Zhurn., 1997, V. 42, №6, p. 684.(in Ukrainian)
30. Omelyan I.P. Longitudinal wave-vector- and frequency-dependent dielectric constant of the TIP4P water model. // Mol. Phys., 1998,

V. 93, №31, p. 123.
31. I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. The modified collective-mode approach: dielectric relaxation in water. // J. Phys.: Condens Matter. 2000, V. 12, L505.
32. I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk, I.M. Mryglod. Wavevector- and frequency dependent shear viscosity of water: the modified collective-mode approach and molecular dynamics calculations. // Condens. Matter Phys. 2005, V. 8, №1(41), p. 25.
33. Bryk T., Mryglod I. Charge density autocorrelation function of molten salts: analytical treatment in the long-wavelength limit. // J. Phys.: Condens Matter, 2004, V. 16, L 463.
34. Bryk T., Mryglod I. Propagating collective excitations in molten salts. // Condens. Matter Phys., 2003, V. 6, №3, p. 395.
35. Bryk T., Mryglod I. Collective excitations in NaCl and NaI: A theoretical generalized collective modes study. // Phys. Rev. B, 2005, V. 71, №13, p. 132202:1-4.
36. Игнатюк В.В., Мрыглод И.М., Токарчук М.В. К теории динамических свойств полуквантового гелия. // Физ. низ. темп., 1999, Т. 25, №5, с. 407.
37. Игнатюк В.В., Мрыглод И.М., Токарчук М.В. Временные корреляционные функции и обобщенные коэфициенты переноса полуквантового гелия. // Физ. низ. темп., 1999, Т. 25, №11, с. 1145.
38. Мриглод І.М., Ігнатюк В.В. Узагальнена гідродинаміка бінарних сумішей. // Журн. фіз. досл., 1997, Т. 1, №1, с. 181.
39. Mryglod I.M. Generalized hydrodynamics of multy-component fluid. // Condens. Matter Phys., 1997, №10, p. 115.
40. Bryk T.M., Mryglod I.M. and Kahl G. Generalized collective modes in a binary $He_{0.65} - Ne_{0.35}$ mixture. // Phys. Rev. E, 1997, V. 56, №3, p. 2903.
41. Bryk T.M., Mryglod I.M. Transverse optic-like modes in a binary liquid. // Phys. Lett. A, 1999, V. 261, №5-6, p. 349.
42. Bryk T.M., Mryglod I.M. Spectra of transverse excitation in liquid glass-forming metallic alloy $Mg_{70}Zn_{30}$: Temperature dependence. // Condens. Matter Phys., 1999, V. 2, №2(18), p. 285.
43. Bryk T., Mryglod I. Collective excitations and generalized transport coefficients in Li_4Pb. // Condens. Matter Phys., 2004, V. 7, №2, p. 285.
44. Bryk T., Mryglod I. Collective excitations in liquid bismuth: the origin of kinetic relaxing modes. // J. Phys.: Condens. Matter, 2001, V. 13, №7, p. 1343.
45. Bryk T., Mryglod I. Generalized collective modes in liquid cesium.

// J. Phys. Studies, 2004, V. 8, №1, p. 35.
46. Scopigno T., Balucani U., Ruocco G., and Sette F. Collective dynamics of liquid alumunium probed by inelastic X-ray scattering. // Phys. Rev. E, 2000, V. 63, 011210.
47. Mokshin A.V., Yulmetyev R.M., Khusnutdinoff R.M., and Hanggi P. Analysis of the dinamics of liquid aluminium: recurrent relation approach. // J. Phys.: Condens. Matter, 2007, V. 19, 046209.
48. Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Омелян И.П., Токарчук М.В. О кинетических уравнениях для плотных газов и жидкостей. // ТМФ, 1991, Т. 87, №1, с. 113.
49. Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Омелян И.П., Токарчук М.В. Обьединение кинетического и гидродинамического подходов в теории плотных газов и жидкостей. // ТМФ, 1993, Т. 96, №3, с. 325.
50. Tokarchuk M.V., Omelyan I.P., Kobryn A.E. A consistent description of kinetics and hydrodynamics of systems of interacting particles by means of the nonequilibrium statistical operator method. // Condens. Matter Phys., 1998, V. 1, №4(16), p. 687.
51. Morozov V.G., Kobryn A.E., Tokarchuk M.V. Modified kinetic theory with consideration for slow hydrodynamical processes. // Condens. Matter Phys., 1994, V. 4, p. 117.
52. Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Kinetic equation for liquids with a multistep potential of interaction. H-theorem. // Physica A, 1996, V. 234, №1,2, p. 89.
53. Kobryn A.E., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. The modified group expansions for constructions of solutions to the BBGKY hierarchy. // J. Stat. Phys., 1998, V. 92, №5/6, p. 973.
54. Kobryn A.E., Morozov V.G., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Enskog-Landau kinetic equation. Calculation of the transport coefficients for charged hard spheres. // Physica A, 1996, V. 230, №1,2, p. 189.
55. Hlushak P.A., Tokarchuk M.V. A consistent description of kinetics and hydrodynamics of quantum Bose-systems. // Condens. Matter Phys., 2004, V. 7, №3(39), p. 639.
56. Ю.А. Церковников. Молекулярная гидродинамика слабо неидеального невырожденого бозе - газа. I. Функции Грина поперечных компонент плотности потока частиц. // ТМФ, 1990, Т. 85, №1, с. 124.
57. Ю.А. Церковников. Двухвременные температурные функции Грина в кинетической теории и молекулярной гидродинамике. I. Цепочка уравнений для неприводимых функций. // ТМФ, 1999, Т. 118, №1, с. 105.
58. Ю.А. Церковников. Двухвременные температурные функции

Грина в кинетической теории и молекулярной гидродинамике. II. Уравнения для систем с парным взаимодействием. // ТМФ, 1999, Т. 119, №1, с. 142.
59. Mryglod I.M., Hachkevych A.M. On nonequilibrium statistical theory of a fluid: linear relaxation theory with different sets of dynamic variables. // Condens. Matter Phys., 1995, V. 5, p. 105.
60. Г.О. Балабанян. Классические равновесные обобщенные гидродинамические корреляционные функции Грина. // ТМФ, 1990, Т. 82, №3, с. 450.
61. Г.О. Балабанян. Классические равновесные обобщенные гидродинамические корреляционные функции Грина. III. Корреляционная функция Грина „плотность - плотность.“// ТМФ, 1990, Т. 85, №1, с. 102.

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alrting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- “Referativnyi Zhurnal”
- “Dzherelo”

CONTACT INFORMATION:
Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +380(322)760908; Fax: +380(322)761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua http://www.icmp.lviv.ua