КОЛЛОИДНЫЙ ЖУРНАЛ, 2025, том 87, № 2, с. 142–148

УДК 539.2:534-143

КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В АМОРФНОМ ЛЬДЕ

© 2025 г. Р. М. Хуснутдинов*

Казанский государственный энергетический университет,

ул. Красносельская, 51, Казань, 420066 Россия

e-mail: khrm@mail.ru

Поступила в редакцию 11.12.2024 г.
После доработки 03.01.2025 г.
Принята к публикации 08.01.2025 г.

Представлены результаты исследования микроскопических коллективных возбуждений в аморфном льде низкой плотности, полученные с помощью моделирования молекулярной динамики на основе моноатомной ML-mW модели потенциала межмолекулярного взаимодействия. Рассчитанные спектры продольного $C_{\mathrm{L}}(k,\omega)$ и поперечного $C_{\mathrm{T}}(k,\omega)$ потоков обнаруживают наличие распространяющихся коллективных возбуждений продольной и поперечной поляризаций в аморфном льде для широкой области значений волновых чисел. Установлена область замешивания продольных и поперечных коллективных мод в аморфном льде низкой плотности. Показано, что температурная зависимость ширины щели k_{gap} в законе дисперсии поперечных акустикоподобных мод описывается линейной зависимостью.

Ключевые слова: молекулярная динамика, аморфный лед низкой плотности, коллективные возбуждения, законы дисперсий

DOI: 10.31857/S0023291225020065, **EDN:** TOZUWL

ВВЕДЕНИЕ

Одной из важных задач физики конденсированного состояния вещества является выяснение механизмов распространения коллективных возбуждений в неупорядоченных средах [1–3]. Так, многие свойства твердых тел связаны с распространением коллективных возбуждений (фононов). Например, энергия и теплоемкость кристаллов легко могут быть рассчитаны в рамках концепции фононов. Следует также отметить, что метод коллективных акустических возбуждений/нормальных мод, даже в гармоническом приближении, способен давать хорошее описание динамики сольватации, спектров поглощения, вычисление констант диффузии. В свою очередь, такой подход позволил описать поверхностные силы в тонких жидких прослойках, ограниченных поверхностями с различным смачиванием [4]. Долгое время оставалось неясным, применим ли этот подход к равновесным и переохлажденным жидкостям (в частности, к аморфным твердым телам), где присутствует динамический беспорядок и отсутствует дальний порядок в расположении частиц (атомов, ионов, молекул) [5, 6]. Так, расчет энергии жидкости как интеграла по корреляционным функциям и потенциалу взаимодействия зависит от специфики многочастичной системы. По этой причине считается, что многие свойства жидкости (термодинамические, транспортные и др.) не могут быть рассчитаны в общем виде, в отличие от твердых тел и газов [7].

В последнее время достоверно установлено, что в неупорядоченных конденсированных средах коллективные возбуждения могут проявляться в виде акустических мод продольной и поперечной поляризаций [8–10]. Исследования продольных акустических мод осуществляются в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов и рентгеновских лучей, а также оптической и ультразвуковой спектроскопии, где экспериментальные данные по флуктуации плотности числа частиц непосредственно связаны со спектральной плотностью временной корреляционной функции продольного потока [11]. Вследствие слабых сдвиговых сил в неупорядоченных многочастичных системах поперечные акустические моды экспериментально трудноопределимы [7]. Так, в работе [12] на основе компьютерного моделирования было установлено, что в простых жидкостях на микроскопических пространственных масштабах наблюдаются поперечные акустикоподобные возбуждения. В экспериментальных работах [13–15] было показано, что поперечные акустические моды в жидкостях могут обнаруживаться в виде «плеч» и «уширений» квазиупругих пиков, наблюдаемых в области низких частот в спектрах динамического структурного фактора $S(k, \omega)$. Впервые поперечные акустикоподобные коллективные моды в спектрах $S(k, \omega)$ наблюдались в 1974 году в молекулярно-динамических результатах для воды [16]. Согласно авторам статьи, природа *вторичных* коллективных возбуждений отождествлялась с продольными акустическими

модами. Однако позже выполненные экспериментальные исследования по неупругому рассеянию рентгеновских лучей [17] и моделированию молекулярной динамики с различными типами потенциалов межмолекулярного взаимодействия [18–20] установили поперечный акустический характер этих возбуждений. Впоследствии акустический характер этой моды был вновь подвергнут сомнению в экспериментах по рассеянию нейтронов [21, 22].

Цель настоящей работы заключается в исследовании процессов распространения коллективных возбуждений в аморфном льде низкой плотности. Система «аморфный лед» является ярким представителем тетраэдрически координированных систем, где за счет сетки водородных связей наиболее отчетливо проявляются эффекты замешивания[1] продольных и поперечных коллективных мод, что, в свою очередь, приводит к увеличению числа ветвей в дисперсии коллективных мод. Особое место в работе уделяется изучению поперечных акустикоподобных возбуждений и особенностям замешивания продольных и поперечных акустических мод в сильно переохлажденных молекулярных жидкостях.

ДЕТАЛИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделирование воды выполнялось в изотермически-изобарическом *NpT*-ансамбле при внешнем давлении $p = 1.0$ атм для широкой области температур ($T = 150–400$ K), включающие области равновесной жидкости и аморфного льда. Система состояла из 32000 молекул, расположенных в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Для стабилизации системы применялся термостат и баростат Нозе-Гувера с параметрами релаксации $\tau_T = 10.0$ фс и $\tau_p = 100.0$ фс соответственно. Взаимодействие между молекулами осуществлялось с помощью крупнозернистой ML-mW модели потенциала межмолекулярного взаимодействия [23], которая корректно воспроизводит фазовую диаграмму и равновесные свойства воды. Данная модель потенциала является улучшенным вариантом mW-модели [24], где оптимизация параметров взаимодействия выполнялась с помощью современных методов машинного обучения [25].

Для получения устойчивой фазы аморфного льда низкой плотности[2] (АЛНП) были выполнены серии модельных экспериментов с различными скоростями охлаждения. Аморфные фазы льда были получены процедурой быстрого охлаждения из равновесного жидкого состояния при температуре $T = 300$ K. Скорости охлаждения систем составляли $\gamma = 0.01$, 0.1, 1.0, 5.0 и 10 K/пс. На рис. 1 представлены температурные зависимости плотности ρ, удельного объема V, потенциальной энергии U и энтальпии H, приходящиеся на одну молекулу. Как видно из рисунка, представленная модель потенциала (ML-mW) корректно воспроизводит фазу аморфного льда низкой плотности ($\rho_{LDA}^{ML\text{-}mW} \approx 0.93 \pm 0.01$ г/см^3) при достаточно низких скоростях охлаждения ($\gamma = 0.01$ и 0.1 K/пс). Кроме того, результаты моделирования с ML-mW потенциалом находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными для температуры максимальной плотности ($T_{TMD} \approx 277$ K). Заметим, что оригинальная mW-модель потенциала для воды приводит к несколько заниженным значениям для температуры максимальной плотности ($T_{TMD} \approx 250$ K) [24, 27]. В то же время моделирование с mW-потенциалом при тех же условиях (при скоростях охлаждения $\gamma = 0.01$ и 0.1 K/пс) приводит к значениям плотности для амфорного льда $\rho_{LDA}^{mW} \approx 0.98 \pm 0.01$ г/см^3. Таким образом, чтобы учесть все особенности коллективных возбуждений молекул в аморфном льде низкой плотности были проведены расчеты для системы с ML-mW потенциалом со скоростью охлаждения $\gamma = 0.01$ K/пс.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 2 представлен статический структурный фактор для воды (при $T = [300; 350]$ K) и аморфного льда (при $T = [150; 250]$ K). Как видно из рисунка, на всей исследуемой температурной области главный максимум $S(k)$ состоит из двух пиков, которые с уменьшением температуры становятся более выраженными. Заметим, что интенсивность правого пика является выше, по сравнению с интенсивностью левого пика, что характерно для аморфного льда низкой плотности [28, 29].

Для исследования процессов распространения коллективных возбуждений в аморфном льде низкой плотности нами были рассчитаны спектральные плотности продольных $C_L(k,\omega)$ и поперечных $C_T(k,\omega)$ колебаний

$$C_\alpha(k,\omega) = \frac{\vartheta_{th}^2 k^2}{\pi}\int_0^\infty C_\alpha(k,t)\exp(i\omega t)\,dt, \qquad (1)$$

а также временные корреляционные функции (ВКФ) продольного

$$C_L(k,t) = \frac{\left\langle \vec{k}\cdot\vec{j}_k^{\,*}(0)\vec{k}\cdot\vec{j}_k(t)\right\rangle}{\left\langle\left|\vec{k}\cdot\vec{j}_k(0)\right|^2\right\rangle} \qquad (2)$$

и поперечного

[1] Эффекты замешивания коллективных мод в изотропных средах проявляются, в частности, в виде поперечных акустикоподобных возбуждений в экспериментах по неупругому рассеянию нейронов и рентгеновских лучей [13–15].

[2] Аморфный лед низкой плотности (с англ. low-density amorphous ice) $\rho_{LDA} \approx 0.94 \pm 0.02$ г/см^3.

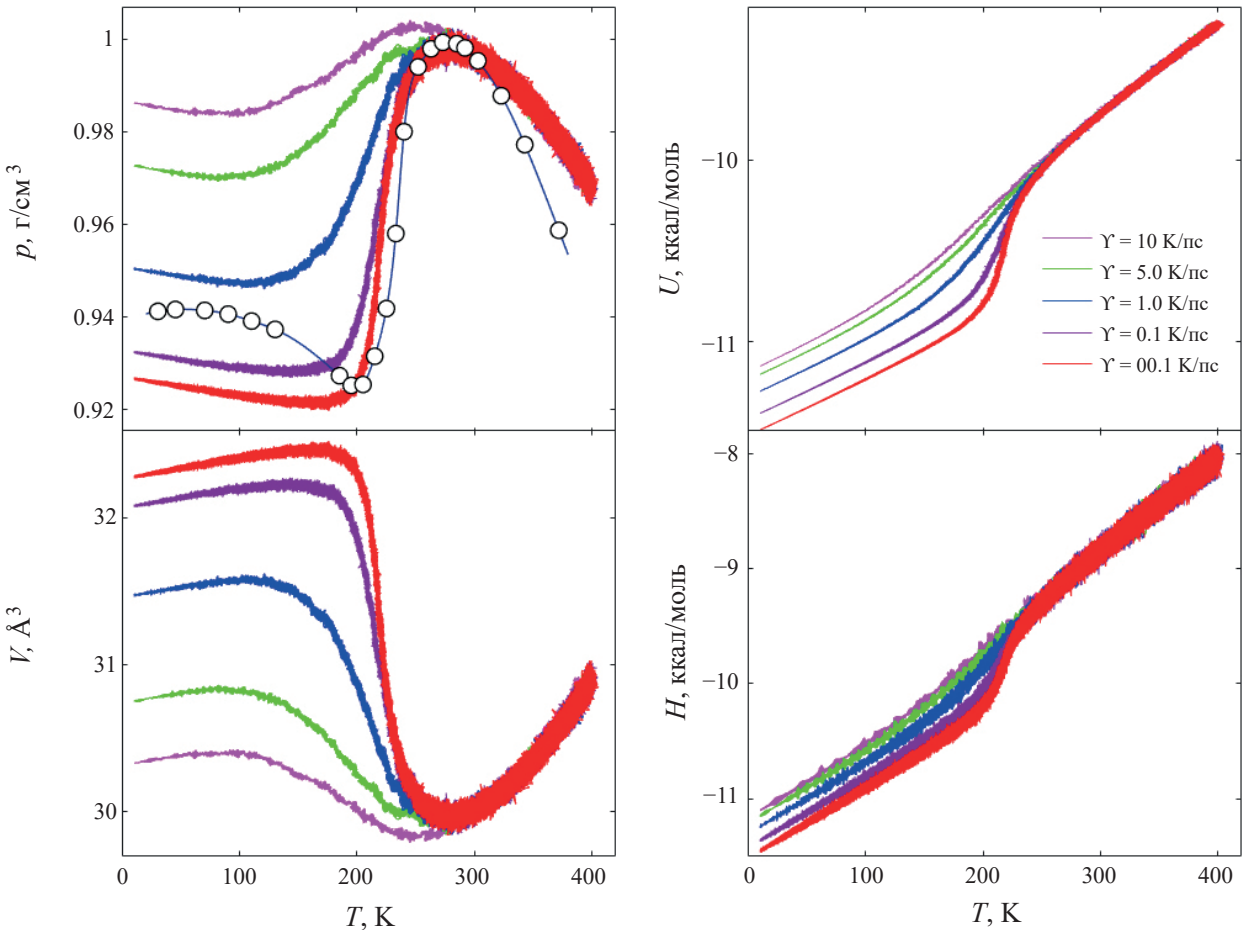


Рис. 1. Температурные зависимости плотности ρ, удельного объема V, потенциальной энергии U и энтальпии H, приходящиеся на одну молекулу: сплошные линии – результаты моделирования, значки (○○○) – экспериментальные данные [26].

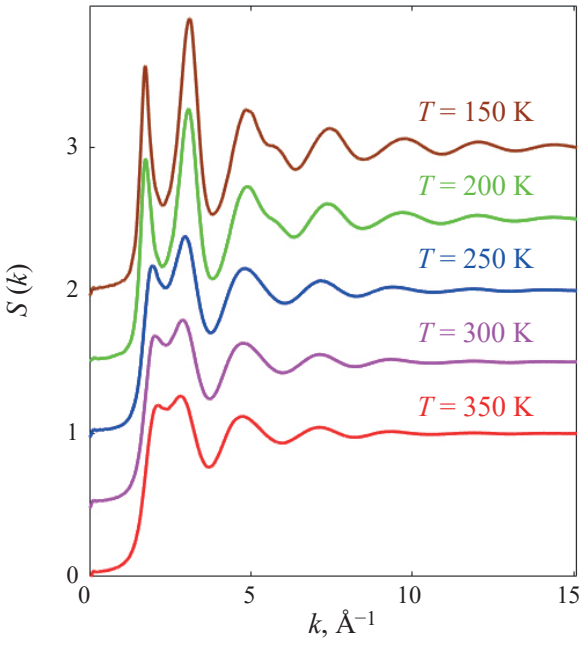


Рис. 2. Статический структурный фактор для воды и аморфного льда при различных температурах.

$$C_{\mathrm{T}}(k,t)=\frac{\left\langle\left[\vec{k},\vec{j}_{\mathrm{k}}^{*}(0)\right],\left[\vec{k},\vec{j}_{\mathrm{k}}(t)\right]\right\rangle}{\left\langle\left[\vec{k},\vec{j}_{\mathrm{k}}(0)\right]^{2}\right\rangle} \qquad (3)$$

потоков [30]. Здесь $\vec{j}(k,t)$ – есть микроскопический поток, определяемый выражением

$$\vec{j}(k,t)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{1}^{\mathrm{N}}\vec{\vartheta}_{1}(t)\exp\left(-i\vec{k}\cdot\vec{r}_{1}(t)\right), \qquad (4)$$

где $\vec{r}_{1}(t)$, $\vec{\vartheta}_{1}(t)$ – есть радиус-вектор и скорость l-й частицы в момент времени t, $\vec{k}$ – волновой вектор. Расчет спектров продольного $C_{\mathrm{L}}(k,\omega)$ и поперечного $C_{\mathrm{T}}(k,\omega)$ потоков на основе уравнений (1)–(4) осуществлялся в три этапа. На первом этапе были рассчитаны динамические переменные микроскопического потока для различного набора волновых чисел $k=\frac{2\pi}{L}\left(\pm n_{x},\ \pm n_{y},\ \pm n_{z}\right)$, где $n_{x},\ n_{y},\ n_{z}=\{0,\ 1,\ 2,\ldots\}$ – есть комбинации любых целых чисел. На втором и третьих этапах последовательно были рассчитаны временные корреляционные

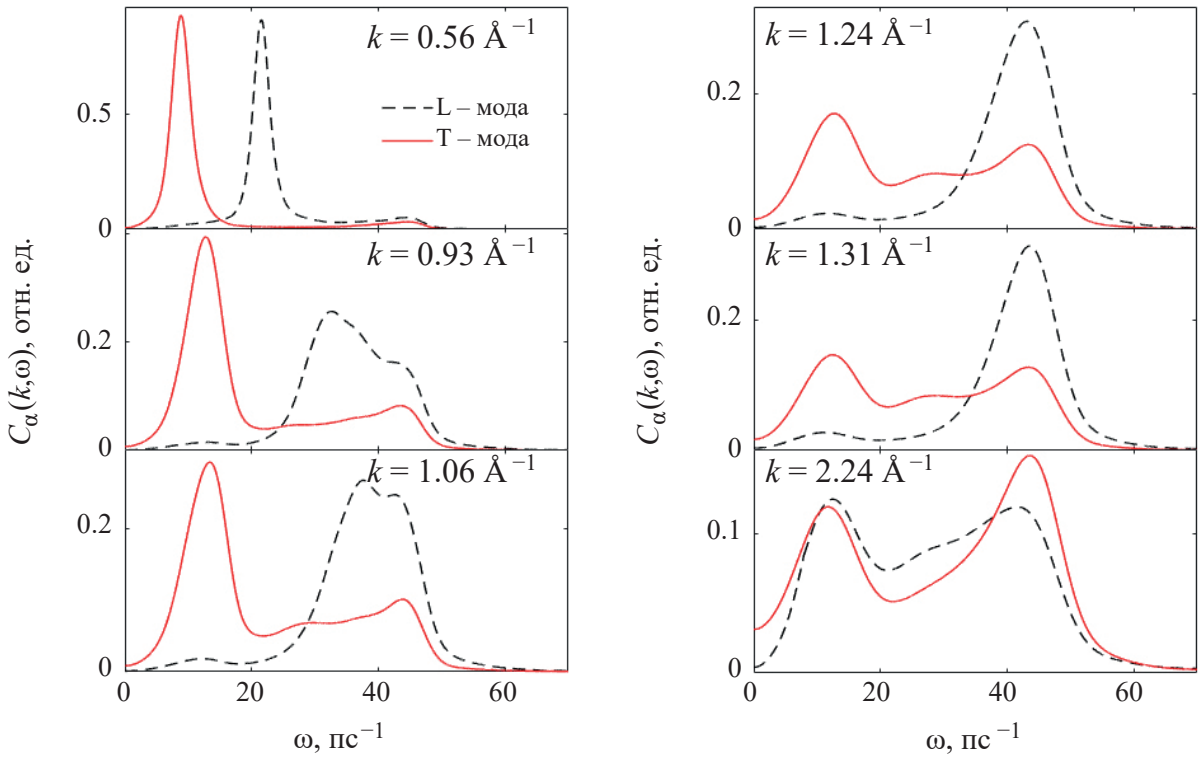


Рис. 3. Спектральные плотности ВКФ продольного (L) и поперечного (T) потоков для аморфного льда низкой плотности при температуре $T = 200$ K для области значений волновых чисел 0.56 Å^{-1} ⩽ k ⩽ 2.24 Å^{-1}.

функции $C_L(k,t)$ и $C_T(k,t)$, из которых с помощью численного Фурье-преобразования были найдены спектры продольного $C_L(k,\omega)$ и поперечного $C_T(k,\omega)$ потоков. Процесс сглаживания кривых заключался: (1) в увеличении выборки значений динамических переменных микроскопического потока для различного набора значений волновых чисел; (2) применение «временного усреднения» при расчете временных корреляционных функций $C_L(k,t)$ и $C_T(k,t)$; (3) усреднения по «окну» при расчете спектров продольного $C_L(k,\omega)$ и поперечного $C_T(k,\omega)$ потоков.

На рис. 3 представлены спектральные плотности ВКФ продольного (пунктирная линия) и поперечного (сплошная линия) потоков для аморфного льда низкой плотности при температуре $T = 200$ K для широкой области значений волновых чисел. Как видно из рисунка, спектры продольных и поперечных потоков характеризуются сложными формами линий, которые отражают многомодовый режим структурной релаксации флуктуаций плотности числа частиц в аморфных молекулярных системах. Полученные из спектральных плотностей $C_L(k,\omega)$ и $C_T(k,\omega)$ законы дисперсий продольных $\omega^{(L)}(k)$ и поперечных $\omega^{(T)}(k)$ коллективных мод представлены на рис. 4. Из рисунка видно, что законы дисперсии характеризуются двумя акустикоподобными ветвями продольной и поперечной поляризации; наличием оптической моды, а также ветвями, являющимися

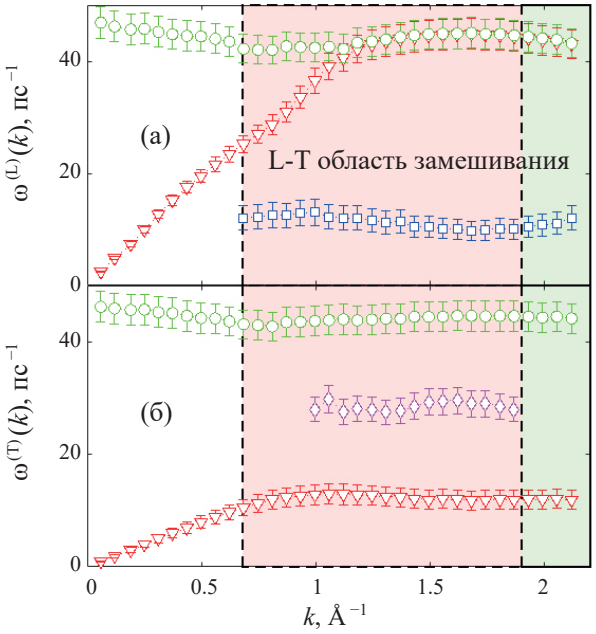


Рис. 4. Дисперсии коллективных возбуждений продольных $\omega^{(L)}(k)$ (а) и поперечных $\omega^{(T)}(k)$ (б) коллективных мод: зелеными значками отмечена оптическая мода; красными, синими и сиреневыми значками отмечены продольные и поперечные акустикоподобные коллективные моды. Пунктирными линиями отмечена область замешивания продольных и поперечных коллективных мод, которая соответствует области левого пика в главном максимуме статического структурного фактора $S(k)$ (рис. 2).

результатом процесса «замешивания» продольных и поперечных акустикоподобных коллективных мод. Область замешивания продольных и поперечных коллективных мод отмечена пунктирными линиями. Следует отметить, что область, при которой наблюдаются процессы замешивания продольных и поперечных коллективных мод соответствует области левого пика в главном максимуме статического структурного фактора $S(k)$ (рис. 2). Заметим, что природа замешивания продольных и поперечных мод не связана с особенностями фазы переохлажденной жидкости, а обусловлена лишь природой межмолекулярного взаимодействия [13–15]. Таким образом, несмотря на то, что моделируемая система описывается огрубленной (моноатомной) моделью потенциала [23], она верно предсказывает особенности микроскопической динамики фазы аморфного льда. А именно, во-первых, модель предсказывает наличие двух акустикоподобных коллективных мод (продольной и поперечной поляризаций) [30]; во-вторых, наличие одной оптической моды; в-третьих, явления замешивания продольных и поперечных мод.

В то же время законы дисперсии продольных и поперечных акустикоподобных мод имеют некоторую зависимость от температуры (рис. 5). Так, в области первой псевдозоны Бриллюэна ($k_m/2$, где k_m есть положение главного максимума в статическом структурном факторе $S(k)$) законы дисперсий претерпевают существенные изменения при переходе из равновесного жидкого состояния в аморфное. В частности, изменение формы кривой и уменьшение щели в законе дисперсии поперечных акустикоподобных мод. Как было показано в работе [9], ширина щели k_{gap} в законе дисперсии поперечных акустикоподобных мод определяет вязкоупругие свойства неупорядоченных систем. Так, в рамках модели Максвелла-Френкеля ширина щели k_{gap} в законе дисперсии $\omega^{(T)}(k)$ связана с временем структурной релаксации флуктуации плотности числа частиц ($\tau \sim \eta_s$) с соотношением:

$$k_{gap} = \frac{1}{2c\tau}.$$

Здесь τ – сдвиговая вязкость, а c – поперечная скорость звука в твердом теле. На рис. 6 представлена температурная зависимость ширины щели в законе дисперсии поперечных акустикоподобных коллективных мод в воде. Как видно из рисунка, результаты моделирования хорошо описываются линейной зависимостью. Стоит также отметить, что при температуре $T \approx 220$ K величина k_{gap} обращается в нуль, что указывает на переход из переохлажденного состояния с жидкостными свойствами в аморфное состояние с преобладанием вязкоупругих и твердотельных свойств [31].

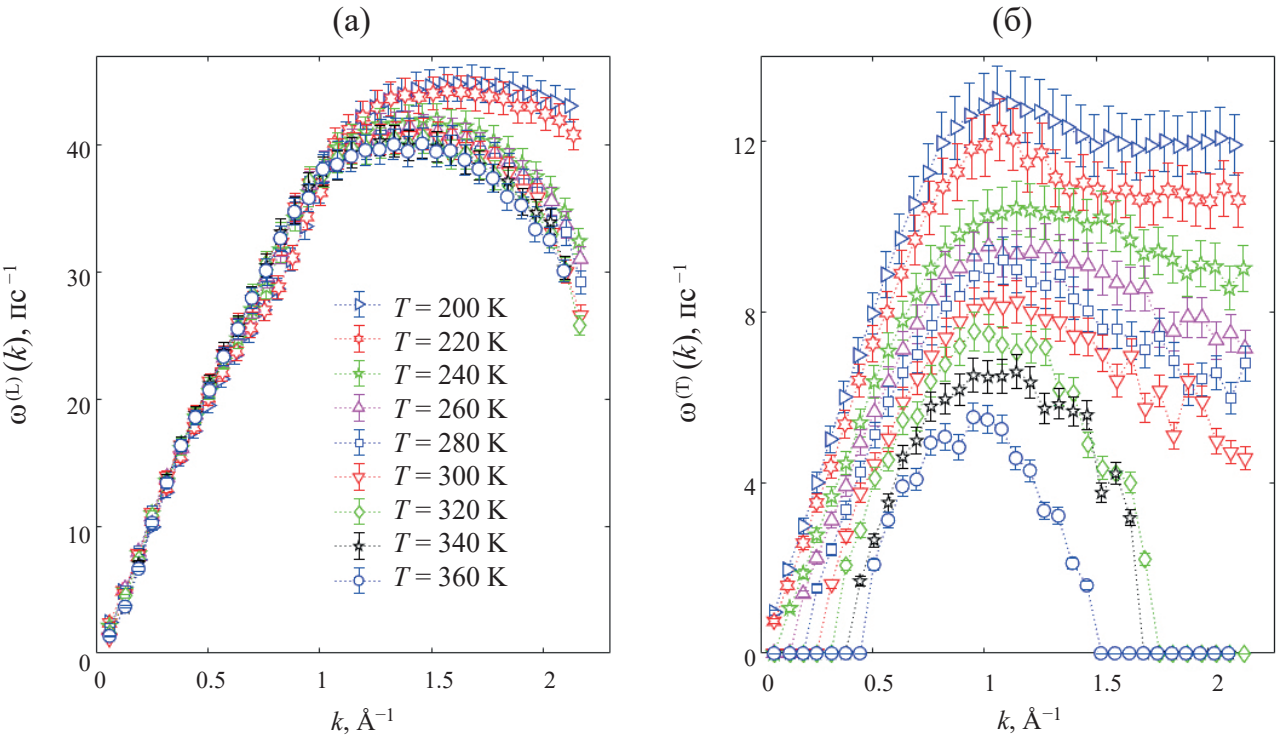


Рис. 5. Законы дисперсий продольных $\omega^{(L)}(k)$ (а) и поперечных $\omega^{(T)}(k)$ (б) акустикоподобных мод для воды при различных температурах.

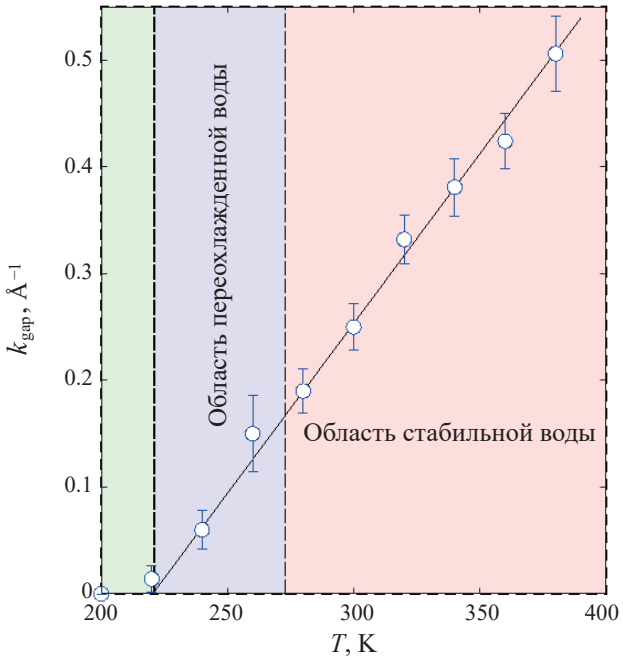


Рис. 6. Температурная зависимость ширины щели в законе дисперсии поперечных акустикоподобных коллективных мод в воде: значки представляют результаты моделирования; сплошная линия – результаты интерполяции линейной зависимостью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлены результаты исследования микроскопической коллективной динамики аморфного льда низкой плотности при температуре $T = 200$ K, полученные с помощью крупномасштабного моделирования молекулярной динамики на основе крупнозернистой ML-mW модели потенциала межмолекулярного взаимодействия. На основе данных по моделированию молекулярной динамике найдены спектральные плотности временных корреляционных функций продольного и поперечного потоков для широкой области значений волновых чисел k. Показано, что ML-mW потенциал по сравнению с mW-моделью достаточно корректно воспроизводит температуру, при которой наблюдается максимальная плотность, а также предсказывает характеристики аморфного льда низкой плотности. Выявлена область замешивания продольных и поперечных коллективных мод в аморфном льде. Установлена, что температурная зависимость величины ширины щели k_{gap} в законе дисперсии поперечных акустикоподобных мод описывается линейной зависимостью, которая при температурах ниже $T \approx 220$ K обращается $k_{gap} = 0$.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

СОБЛЮДЕНИЕ ЭТИЧЕСКИХ СТАНДАРТОВ

В данной работе отсутствуют исследования человека или животных.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Montfrooij W. and de Schepper I.* Excitations in simple liquids, liquid metals and superfluids. New York: Oxford University Press, 2010.
2. *Pines D.* Elementary excitations in solids. New York - Amsterdam: W.A. Benjamin Inc, 1963.
3. *Boon J.P., Yip S. Molecular Hydrodynamics. New York: McGraw-Hill, 1980.*
4. *Boinovich L.B., Emelyanenko A.M.* Forces due to dynamic structure in thin liquid films // Adv. Colloid Interf. Sci. 2002. V. 96. P. 37–58. https://doi.org/10.1016/s0001-8686(01)00074-4
5. *Френкель Я.И.* Кинетическая теория жидкостей. Ленинград: Наука, 1975.
6. *Barrat J.-L. and Hansen J.-P.* Basic concepts for simple and complex liquids. Cambridge: University Press, 2003.
7. *Balucani U. and Zoppi M.* Dynamics of the liquid state. Oxford: Clarendon Press, 1994.
8. *Brazhkin V.V., Trachenko K.* Collective excitations and thermodynamics of disordered state: New insights into an old problem // J. Phys. Chem. B. 2014. V. 118. P. 11417–11427. https://doi.org/10.1021/jp503647s
9. *Trachenko K., Brazhkin V.V.* Collective modes and thermodynamics of the liquid state // Rep. Prog. Phys. 2016. V. 79. P. 016502. https://doi.org/ 10.1088/0034-4885/79/1/016502
10. *Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В.* Атомарные коллективные возбуждения в жидком свинце // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. С. 42. https://doi.org/10.7868/S0370274X14130086
11. *March N.H.* Liquid metals: Concepts and theory. Cambridge: Cambridge University Press, 1990.
12. *Levesque D., Verlet L., Kurkijarvi J.* Computer “experiments” on classical fluids. iv. transport properties and time-correlation functions of the Lennard-Jones liquid near its triple point // Phys. Rev. A. 1973. V. 7. P. 1690. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.7.1690
13. *Hosokawa S., Munejiri S., Inui M., Kajihara Y., Pilgrim W.-C., Ohmasa Y., Tsutsui S., Baron A.Q.R., Shimojo F., Hoshino K.* Transverse excitations in liquid Sn // J. Phys. Condens. Matter. 2013. V. 25. P. 112101. https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/11/112101

14. *Hosokawa S., Munejiri S., Inui M., Kajihara Y., Pilgrim W.-C., Baron A.Q.R., Shimojo F., Hoshino K.* Transverse excitations in liquid metals // AIP Conf. Proc. 2013. V. 1518. P. 695–702. https://doi.org/10.1063/1.4794661
15. *Hosokawa S., Inui M., Kajihara Y., Tsutsui S., Baron A.Q.R.* Transverse excitations in liquid Fe, Cu and Zn // J. Phys.: Condens. Matter. 2015. V. 27. P. 194104. https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/19/194104
16. *Rahman A., Stillinger F.H.* Propagation of sound in water. A molecular-dynamics study // Phys. Rev. A. 1974. V. 10. P. 368. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.10.368
17. *Sette F., Ruocco G., Krisch M., Masciovecchio C., Verbeni R., Bergmann U.* Collective dynamics in water by high energy resolution inelastic X-Ray scattering // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 75. P. 850. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.850
18. *Ricci M.A., Rocca D., Ruocco G., Vallauri R.* Collective dynamical properties of liquid water // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 1958. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.1958
19. *Sastry S., Sciortino F., Stanley H.E.* Collective excitations in liquid water at low frequency and large wave vector // J. Chem. Phys. 1991. V. 95. P. 7775–7776. https://doi.org/10.1063/1.461354
20. *Bertolini D., Tani A.* Generalized hydrodynamics and the acoustic modes of water: Theory and simulation results // Phys. Rev. E. 1995. V. 51. P. 1091. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.51.1091
21. *Petrillo C., Sacchetti F., Dorner B., Suck J.-B.* High-resolution neutron scattering measurement of the dynamic structure factor of heavy water // Phys. Rev. E. 2000. V. 62. P. 3611. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.62.3611
22. *Sacchetti F., Suck J.-B., Petrillo C., Dorner B.* Brillouin neutron scattering in heavy water: Evidence for two-mode collective dynamics // Phys. Rev. E. 2004. V. 69. P. 061203. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.69.061203
23. *Chan H., Cherukara M.J., Narayanan B., Loeffler T.D., Benmore C., Gray S.K., Sankaranarayanan S.* Machine learning coarse grained models for water // Nat. Commun. 2019. V. 10. P. 379. https://doi.org/10.1038/s41467-018-08222-6
24. *Molinero V., Moore E.B.* Water Modeled As an Intermediate Element between Carbon and Silicon // J. Phys. Chem. B. 2009. V. 113. P. 4008–4016. https://doi.org/10.1021/jp805227c
25. *Yunusov M.B., Khusnutdinoff R.M.* Neural network model for predicting the atomization energy of multiatomic molecules based on sorted Coulomb matrices // High Energy Chemistry. 2024. V. 58. P. S286. https://doi.org/10.1134/S0018143924701017
26. *Mallamace F., Corsaro C., Stanley H.E.* Possible relation of water structural relaxation to water anomalies // PNAS. 2013. V. 110. P. 4899. https://doi.org/10.1073/pnas.1221805110
27. *Хуснутдинов Р.М.* Микроскопическая коллективная динамика воды // Коллоид. журн. 2016. Т. 78. № 2. С. 208. https://doi.org/10.7868/S0023291216010092
28. *Guthrie M., Tulk C.A., Benmore C.J., Klug D.D.* A structural study of very high-density amorphous ice // Chem. Phys. Lett. 2004. V. 397. P. 335. https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.07.116
29. *Хуснутдинов Р.М.* Динамика сетки водородных связей при электрокристаллизации воды // Коллоид. журн. 2013. Т. 75. № 6. С. 792. https://doi.org/10.7868/s0023291213060062
30. *Хуснутдинов Р.М.* Структурные и динамические особенности воды и аморфного льда // Коллоид. журн. 2017. Т. 79. № 1. С. 104. https://doi.org/10.7868/S0023291217010074
31. *Mishima O.* Polyamorphism in water // Proc. Jpn. Acad., Ser. B. 2010. V. 86. P. 165. https://doi.org/10.2183/pjab.86.165

COLLECTIVE EXCITATIONS IN AMORPHOUS ICE

R. M. Khusnutdinoff

The paper presents the results of a study of microscopic collective excitations in low-density amorphous ice obtained by molecular dynamics simulation based on the monatomic ML-mW model of the intermolecular interaction potential. The calculated spectra of longitudinal $C_L(k,\omega)$ and transverse $C_T(k,\omega)$ currents reveal the presence of propagating collective excitations of longitudinal and transverse polarizations in amorphous ice for a wide range of wavenumbers. The region of mixing of longitudinal and transverse collective modes in low-density amorphous ice is established. It is shown that the temperature dependence of the gap width k_{gap} in the dispersion law of transverse acoustic-like modes is described by a linear dependence.

Keywords: molecular dynamics, low-density amorphous ice, collective excitations, dispersion laws