УДК 538.958

Расчет высокочастотной асимптотики промежуточной функции рассеивания тепловых нейтронов методами молекулярной динамики

Д. Ю. Флейта[1,2]
[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)
[2]Объединенный институт высоких температур РАН

Определение спектра промежуточной функции рассеяния (ПФР) тепловых нейтронов является одной из основных задач в физике нейтронов низких энергий. Эта функция даёт важнейшую информацию о характере теплового движения молекул газа, жидкости, твердых тел. Несмотря на это, в настоящее время хорошо изученным является только спектр промежуточной функции рассеяния в длинноволновом пределе, или другими словами, в области применимости диффузионного приближения. Ситуация усложняется, как только волновой вектор, пропорциональный импульсу передачи, становится сравним с обратным межчастичным расстоянием ($|\vec{k}| \approx 1/a$). В этом случае, спектральная функция должна иметь гауссовский характер, как было показано в работах [1-2]. При дальнейшем увеличении волнового вектора, спектр ПФР еще раз претерпевает изменение ($F(k,\omega) \sim \exp\left[-(\tau(\vec{k}^2)\omega)^{2/3}\right]$) [3]. Очень существенным обстоятельством является то, что тонкие детали спектра ПФР зависят от крутизны отталкивающей части межмолекулярного потенциала.

Исследованию этой проблемы посвящена настоящая работа. Работа включает, с одной стороны, построение спектра ПФР с помощью молекулярной динамики, а так же сравнение с экспериментальными данными исследований [4] с другой. При расчетах использовался потенциал вида Леннарда-Джонса для системы 1331 частицы аргона с параметрами $\varepsilon = 119.1 K_B$ и $\sigma = 3.4$ Å, согласно оригинальной работе [5]. В исходной конфигурации атомы располагались равномерно внутри расчетной ячейки с ребром $l = 4.07^{-7}$ см, с наложенными периодическими граничными условиями. При моделировании процесса температура жидкого аргона поддерживалась постоянной посредством применения термостата Берендсена, наряду со схемой Верле расчета траекторий движения [6]. Аналогичной методикой [5] определяется пространственно-временная корреляционная функция Ван-Хова. Отдельные этапы моделирования были рассмотрены в источнике [6], но в силу большого объема вычислений даже для малого кластера молекул, было выполнено моделирование с использованием технологий расчета на GPU, посредством компиляции программы в доступной среде, а выполнения непосредственно на многопроцессорном видеоядре с поддержкой CUDA библиотек [7].

В процессе работы получены две различные по своему характеру спектральные зависимости, для сверток с различными волновыми векторами передачи импульса. Как видно из Рис. 1-2, в случае $\vec{k}^2 >> 1\text{Å}^{-2}$ наблюдается парабаличное спадание ПФР на начальном отрезке, а в случае $\vec{k}^2 \le 1\text{Å}^{-2}$ начальный этап имеет диффузионную структуру. Так же в работе обсуждается вид зависимости высокочастотной части ПФР, соответствующей малым временам и смещениям молекул.

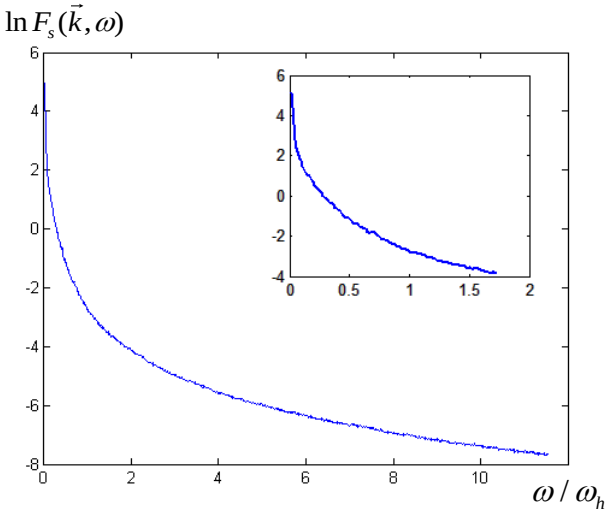

Рис. 1. Полученная $\ln F_s(\vec{k},\omega)$ *при* $k = 1.0\,\text{Å}^{-1}$

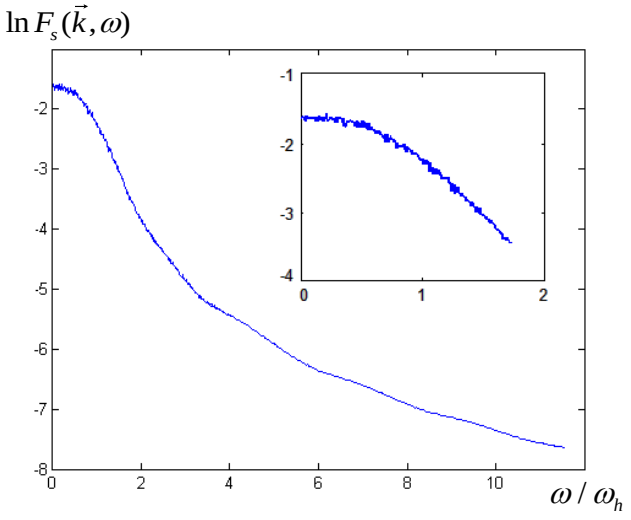

Рис. 2. Полученная $\ln F_s(\vec{k},\omega)$ *при* $k = 7.0\,\text{Å}^{-1}$

Проведено сравнение с экспериментальными данными для ПФР для других жидкостей [4] на Рис. 3-4. Обсуждается корректность экстраполяции на простые жидкости.

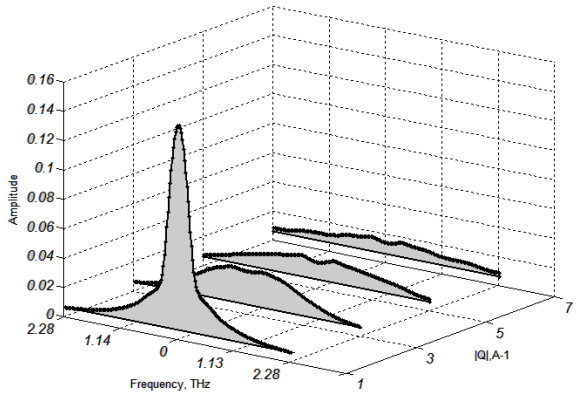

Рис 3. Полученная частотная зависимость $F_s(\vec{k},\omega)$

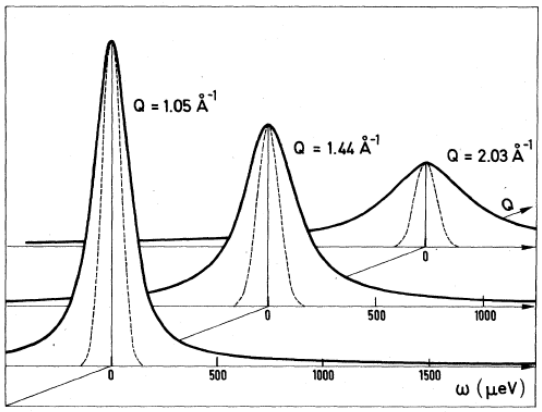

Рис. 4 Экспериментальные данные [4] для $F_s(\vec{k},\omega)$

Литература

1. *D. Kivelson and P. A. Madden,* Light Scattering Studies of Molecular Liquids, –Ann. Rev. Phys. Chem., Vol. 31, 1980, p. 523-558 .
2. *A. J. Barnes, W. J. Orville-Thomas, and I. Yarwood*, Molecular liquids: Dynamics and interactions, –NATO ASI Series C, 1984, p. 548.
3. *V. Y. Bardik, N. P. Malomuzh, K. S. Shakun*, High-frequency asymptote for the velocity auto-correlation function spectrum of argon-like systems. – J. Chem. Phys. 136(24), 2012, p. 136.
4. *J. Teixeira, M.C. Bellissent-Funel, S.H. Chen, A.J. Dianoux,* Experimental determination of the nature of diffusive motions of water molecules at low temperatures, – Phys. Rev. A, Vol. 31, 1985, p. 1913-1917.
5. *A. Rahman,* Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon, –Phys. Rev. 136, 1964, A405-A411.
6. *Соловьев М.М., Соловьев М.Е.*, Компьютерная химия. –М.; СОЛОН-Пресс, 2005, 536 с.
7. *Боресков А.В., Харламов А.А.*, Основы работы с технологией CUDA. – М.; ДМК Пресс, 2010, 232 с.