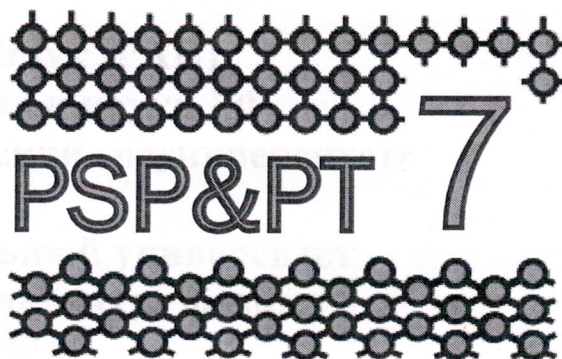


Труды международного  
междисциплинарного  
симпозиума



Физика  
поверхностных явлений  
межфазных границ  
и фазовые переходы

**Physics of  
surphase phenomena  
interface boundaries  
and phase transitions**

выпуск 7    issue 7  
том I    volume I

16-21 сентября 2017  
Нальчик - Ростов-на-Дону - пос.Южный  
(п.Южный), Россия

При поддержке  
Российского фонда  
фундаментальных исследований

## ОСОБЕННОСТИ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА, ОДНОЧАСТИЧНАЯ И КОЛЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА В ЖИДКОМ ГАЛЛИИ

**А.В. Мокшин**

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики,  
ул. Кремлевская 18, Казань 420008, Россия  
e-mail: anatolii.mokshin@mail.ru*

Анализ данных дифракции нейтронов и рентгеновских лучей, а также результатов данных молекулярной динамики позволяет получить ряд выводов по структуре расплава галлия на изобаре  $p=1.0$  атм. для температурной области от  $T=313$  К до  $T=1273$  К. Установлено, что ближний порядок в расплаве галлия при статистической трактовке характеризуется диапазоном значений корреляционной длины, где существенный вклад оказывают димеры с короткой связью. Температурная зависимость коэффициента самодиффузии, рассчитанная на основе молекулярной динамики, имеет хорошее согласие с экспериментальными данными по рассеянию медленных нейтронов. Вычисление спектров динамического структурного динамического фактора и спектральных плотностей локального потока частиц на основе данных моделирования молекулярной динамики расплава обнаруживает наличие акустических колебаний продольной и поперечной поляризации, что полностью согласуется с экспериментальными данными. Установлено, что плотность колебательных состояний воспроизводится обобщенной дебаевской моделью.

## SHORT-RANGE ORDER, SINGLE-PARTICLE AND COLLECTIVE DYNAMICS IN LIQUID GALLIUM

**A.V. Mokshin**

*Kazan Federal University, Institute of Physics,  
Kremlevskaya Str. 18, 420008 Kazan, Russia  
e-mail: anatolii.mokshin@mail.ru*

Analysis of the data of neutron and X-rays diffraction as well as of the results of molecular dynamics simulations allows one to obtain the conclusions about the structure of gallium melt at the isobar  $p=1.0$  atm. for the temperature range from  $T=313$  K to  $T=1273$  K. It is revealed by means of the statistical treatment that the short-range order in the gallium melt is characterized by the range of the correlation length values, where the significant impact has the dimers with a short bond. The temperature dependence of the self-diffusion coefficient evaluated on the basis of molecular dynamics simulation data is in agreement with experimental neutron scattering data. The dynamic structure factor spectra as well as the spectral densities of local current computed by means of molecular dynamics simulation data allows one to reveal the acoustic-like dispersions associated with longitudinal and transverse polarizations, that is completely in agreement with experimental data. It is found that the vibration density of states of liquid gallium is reproduced correctly by the generalized Debye model.

Информация о взаимном расположении частиц произвольной системы содержится в экспериментально измеряемом статическом структурном факторе  $S(k)$  - величине, которая связывается функцией радиального распределения  $g(r)$ . Так, на рис.1 представлены кривые  $g(r)$  и  $S(k)$ , рассчитанные для жидкого галлия при разных температурах. Как видно из рисунка, выраженный первый максимум на обеих кривых [ $g(r)$  и  $S(k)$ ] с увеличением аргумента [ $r$  и  $k$  соответственно] трансформируется в быстро затухающие осцилляции. При этом первый максимум в обеих функциях  $g(r)$  и  $S(k)$  характеризуется выраженной асимметрией. С уменьшением температуры в правой части главного максимума статического структурного фактора  $S(k)$  появляется выраженное "плечо". Анализ функции радиального распределения  $g(r)$  обнаруживает, что первая координационная сфера, характеризуется не единственными

значением, а определенным диапазоном. При этом значительный вклад в особенности локальной структуры вносят димеры - атомарные пары, в которых расстояние между центрами атомов меньше  $2.72\text{\AA}$ . Отметим, что ранее существование подобных квази-молекул  $\text{Ga}_2$  экспериментально наблюдалось в случае кристаллического галлия [1].

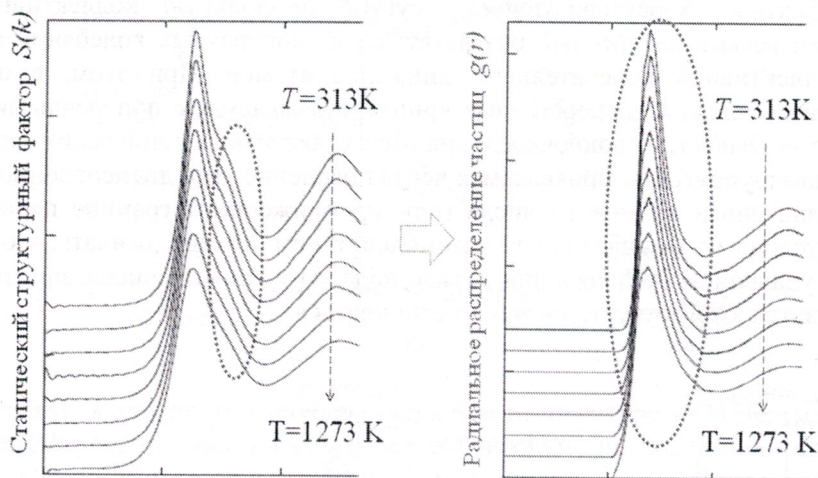


Рис. 1 - Структурные характеристики жидкого галлия при различных температурах.

К настоящему времени имеются довольно противоречивые сведения о температурной зависимости коэффициента самодиффузии жидкого галлия. Представленные в данной работе данные моделирования согласуются результатами экспериментальных измерений по рассеянию медленных нейтронов. Подгонка температурной зависимости коэффициента самодиффузии жидкого галлия с помощью уравнения Аррениуса обнаруживает температуру перехода  $600\text{ K}$  (см.рис. 2). Как следует из анализа спектральной плотности автокорреляционной функции скорости частиц, при этой же температуре происходит переход ведущей роли в одночастичной динамике от колебательной к диффузионной.

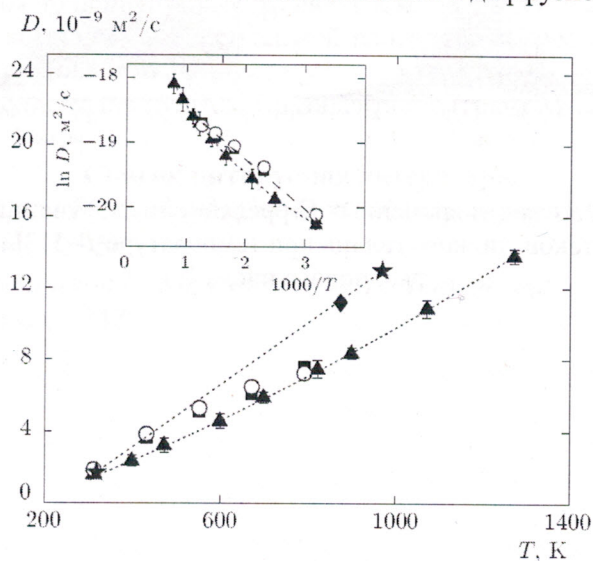
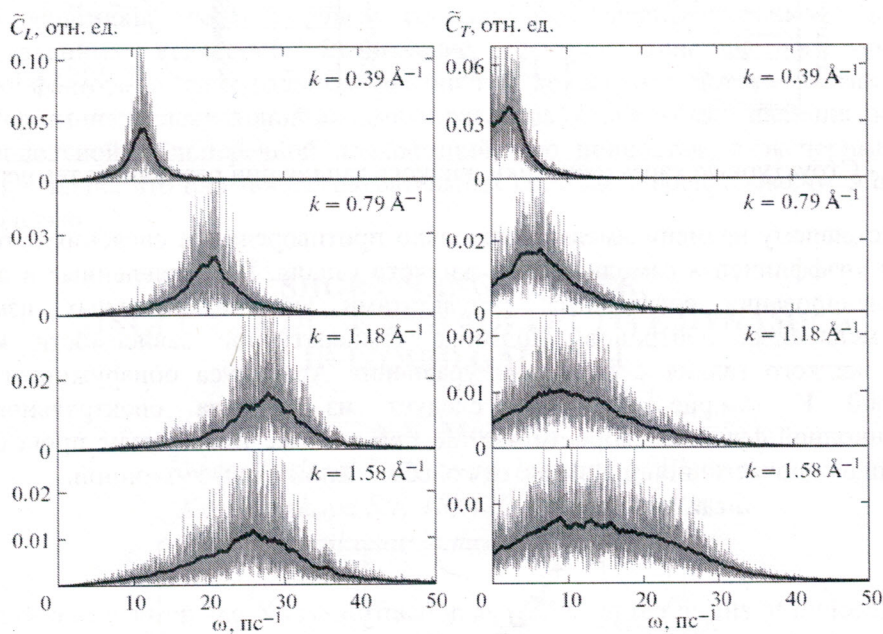


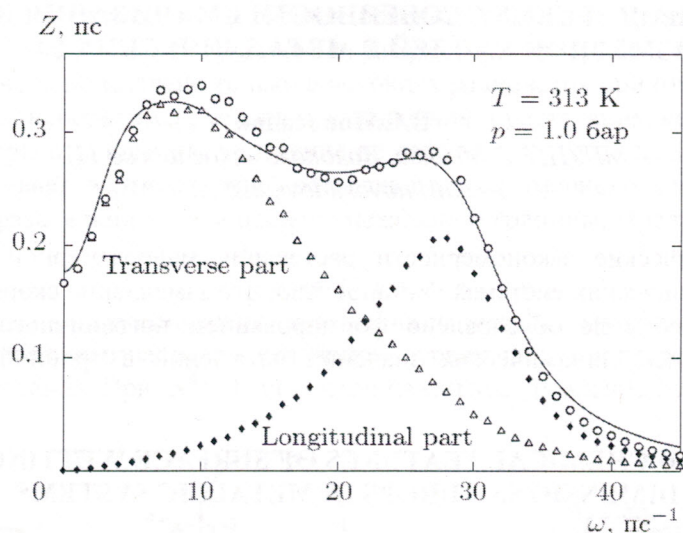
Рис. 2 - Температурные зависимости коэффициента самодиффузии  $D(T)$  расплава галлия: темные треугольники - результаты молекулярной динамики; кружки, квадраты и ромб (единственное значение) - экспериментальные данные рассеяния нейтронов; звездочки - результаты квантово-механических расчетов.

Результаты настоящей работы указывают на наличие в коллективной динамике атомов жидкого галлия двух дисперсионных ветвей, характеризующих распространение акустико-

подобных возбуждений продольной и поперечной поляризации. Так, на рис. 3 представлены спектральные плотности временных корреляционных функций продольного и поперечного потоков жидкого галлия при температуре  $T=313\text{K}$  и разных значениях волнового числа  $k$ . Сопоставляя эти результаты с экспериментально измеренными спектрами динамического структурного фактора, характеризующими сугубо продольную коллективную динамику атомов, получаем весьма интересный результат: "след" поперечных колебаний присутствует в продольной коллективной колебательной динамике атомов. При этом, в области малых значений волнового числа  $k$  дисперсионная кривая, связываемая с поперечными колебаниями, отсутствует, что указывает, в свою очередь, на отсутствие макроскопических свойств расплава. В то же время, квазиупругость, проявляемая через появление этой дисперсионной кривой лишь при конечных значениях волнового числа (при приближении к границе первой псевдозоны Бриллюэна), обусловлена межчастичным взаимодействием. Можно ожидать, что с увеличением температуры и удалением от плавления размер области волновых чисел, при которых данная дисперсионная ветвь, отсутствует, должен увеличиваться.



**Рис. 3** - Спектральные плотности временных корреляционных функций продольного  $C_L(k, \omega)$  и поперечного  $C_T(k, \omega)$  потоков жидкого галлия при температуре  $T=313\text{K}$  и различных значениях волнового числа  $k$ .



**Рис. 4** - Спектральная плотность жидкого галлия при температуре  $T=313\text{K}$ : сплошная линия - результаты молекулярно-динамического расчета; кружки - предсказания в соответствии с обобщенной дебаевской моделью [2]; ромбы и треугольники соответствуют продольному и поперечному вкладам (пояснения даются в работе [2]).

Наличие спектральных плотностей корреляционных функций продольного и поперечного потоков, полученных из результатов моделирования для достаточно широкой области волнового числа  $k$ , позволяет выполнить расчет плотности колебательных состояний в рамках обобщенной дебаевской модели. Уставлено, что бимодальный характер плотности колебательных состояний жидкого галлия при температурах вблизи плавления (см. рис. 4) определяется колебательной одночастичной динамикой, дающей вклад в формирование акустико-подобных коллективных возбуждений продольной и поперечной поляризации. При этом обобщенная дебаевская модель позволяет осуществить учет и разделение этих двух вкладов. В результате можно получить выражение для коэффициента самодиффузии, в которое входят низкочастотные компоненты спектральной плотности поперечного потока для области волновых чисел, а также волновое число Дебая [2].

Работа частично поддержана грантом Президента РФ (грант МД-5792.2016.2).

#### Список цитируемой литературы

1. Лятин А. Г., Громницкая Е. Л., Ягафаров О. Ф., Стальгорова О. В., Бражкин В. В. //ЖЭТФ, 2008. Т. 134. С. 956.
2. Мокшин А. В., Хуснутдинов Р. М., Новиков А. Г., Благовещенский Н. М., Пучков А. В. //ЖЭТФ, 2015. Т. 148. С. 947.