

УДК 531.19

П. Аргиракис, проф., доктор; А. Скарпалезос, асп.
(Университет имени Аристотеля, г. Салоники, Греция);

В. С. Вихренко, проф., д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

ПРОЯВЛЕНИЕ ЭФФЕКТОВ ПАМЯТИ В ПРОМЕЖУТОЧНОЙ ФУНКЦИИ РАССЕЯНИЯ РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА.

В докладе изложены результаты исследования с помощью моделирования по динамическому методу Монте-Карло некогерентной промежуточной функции рассеяния (НПФР) решеточного флюида (взаимодействующего решеточного газа) на трехмерной кубической решетке. Учтены межчастичные взаимодействия между ближайшими соседями при температуре несколько превышающей критическую. Использовано специальное представление НПФР в виде экспоненты, в показателе которой произведение среднего коэффициента диффузии меченых атомов, геометрического фактора решетки и времени, взятое с отрицательным знаком. Это позволяет выделить эффекты памяти, включенные в зависимость коэффициента диффузии от времени и волнового вектора. Предложено аналитическое выражение для среднего по времени коэффициента диффузии, позволяющее воспроизвести данные моделирования НПФР.

Проведено сопоставление с ранее рассмотренной двумерной системой на квадратной решетке [1]. Основным отличием от двумерного случая является то, что временная зависимость некоторых характеристик коэффициента диффузии в трехмерном случае не может быть описана экспоненциально убывающей функцией времени, но требует использования укороченных экспонент с малыми значениями показателей порядка десятых долей единицы. Помимо этого, зависимость коэффициента диффузии от времени при нулевом значении волнового вектора определяется тремя временами релаксации в отличие от двумерного случая, который описывается двумя временами релаксации.

Показано, что при зависящем от времени коэффициенте диффузии среднеквадратичное смещение частицы равно интегралу по времени от коэффициента диффузии. Гидродинамическое значение коэффициента диффузии (в пределе больших времен и малых волновых векторов), определенное по результатам моделирования НПФР, хорошо согласуется с результатами прямого его определения по среднему квадрату смещения частиц во всем исследованном интервале концентраций.

ЛИТЕРАТУРА

1 L. Skarpalezos, N. Tsakiris, P. Argyrakis, and V. S. Vikhrenko. Phys. Rev. B – 2011. – Vol. 84. – Art. #075476.