ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, № 4 (1997) с. 564–569

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 4 (1997) p. 564–569

ЧАСОВІ АВТОКОРЕЛЯЦІЙНІ ФУНКЦІЇ ШВИДКОСТІ КЛАСТЕРІВ З ЦИКЛІЧНИМИ ГРАНИЧНИМИ УМОВАМИ

І. І. Тальянський, А. Т. Максимов
Львівський державний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики
Україна, UA–290005, Львів, вул. Драгоманова, 12
(Отримано 3 березня 1997)

Досліджено можливість застосування методу молекулярної динаміки до розрахунку коливних спектрів у кристалах. В основі цього підходу є той факт, що Фур'є–зображення автокореляційної функції швидкости визначає густину коливань атомів. Знайдено аналітичні вирази і виконано комп'ютерні розрахунки методом молекулярної динаміки автокореляційної функції та її Фур'є–зображення в моделі лінійного циклічно замкнутого ланцюжка атомів двох сортів (модель йонного кристала). Графік Фур'є–зображення має вигляд сукупности різних піків, положення яких визначають частоти нормальних коливань, а їхні площі пов'язані з масами тих атомів, які коливаються під час збудження даної моди коливань. Вивчено коливання ланцюжків (кластерів) з кількістю атомів N=4 і 8. У випадку $N = 4$ результати порівнюють з аналітичним розрахунком. Результати повністю збігаються, що свідчить про перспективність застосування методу молекулярної динаміки до розрахунків коливних спектрів кристалів. Для $N = 8$ зроблено порівняння цього методу з результатами, одержаними шляхом діягоналізації відповідної матриці.

Ключові слова: коливання ґратки, автокореляційна функція швидкости, кластери, циклічні граничні умови.

PACS number(s): 63.10.+a, 63.20 Pw

I. ВСТУП

Автокореляційні функції швидкости $\langle \mathbf{v}(t_1)\mathbf{v}(t_2)\rangle$, де $\langle ...\rangle$ означає квантово–механічне і термодинамічне усереднення, вперше введені у праці Ван Хове [1], в якій було з'ясовано зв'язок між подвійним диференціяльним перерізом розсіяння теплових нейтронів $d^2\Omega/dEd\Omega$ і просторово–часовою кореляційною функцією $G(\mathbf{r},t)$. В класичному випадку $G(\mathbf{r},t)$ визначає ймовірність перебування частинки в точці $\mathbf{r}$ у момент часу t. Відповідно $G(\mathbf{r},t)$ в певному наближенні, яке називають ґауссовим, може бути виражене через автокореляційну функцію швидкости.

У подальшому цю функцію інтенсивно досліджували у зв'язку з тим, що через неї, як виявилось, можна виразити цілу низку величин, які характеризують термодинамічні і кінетичні властивості конденсованих систем.

Успіх цих досліджень був зумовлений, передусім, тим, що саме в той період (50–60-ті роки) почав інтенсивно розвиватись метод молекулярної динаміки (МД), який було застосовано, зокрема, і для обчислення кореляційних функцій.

Ідея методу МД, як відомо, є такою [2, 3]. Розглядають класичну систему N частинок із заданим потенціялом взаємодії між ними. Класичні рівняння руху частинок розв'язують числово за допомогою різницевих методів і знаходять $\mathbf{r}_1(t),...,\mathbf{r}_N(t),\mathbf{p}_1(t),...,\mathbf{p}_N(t)$. Далі на основі ерґодичної гіпотези визначають термодинамічне середнє для будь-якої функції термодинамічних змінних за формулою

$$\langle f\rangle = \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int\limits_0^\tau f(\mathbf{r}_1(t),...,\mathbf{r}_N(t)\mathbf{p}_1(t),...,\mathbf{p}_N(t))dt. \quad (1)$$

У цьому випадку температуру T визначають співвідношенням

$$T = \frac{1}{3k_BN}(\sum_{i=1}^N m_i\mathbf{v}_i^2),$$

де k_B — стала Больцмана.

Останніми роками метод МД знову почав привертати до себе увагу у зв'язку з новими можливостями сучасної обчислювальної техніки [4–7]. Найбільше метод МД застосовують у теорії рідин для дослідження їхніх термодинамічних і кінетичних властивостей.

У праці [8] автокореляційна функція швидкости була розрахована для рідкого аргону з використанням потенціялу взаємодії Леннарда–Джонса. Цю функцію обчислювали за формулою

$$\langle \mathbf{v}(0)\mathbf{v}(t)\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i(0)\mathbf{v}_i(t). \quad (2)$$

Суттєвим є те, що у випадку рідини в стані термодинамічної рівноваги функція $V_2(t_1,t_2) = \langle \mathbf{v}(t_1)\mathbf{v}(t_2)\rangle$ залежить лише від різниці часів $t_2 - t_1$. Тому можна так вибрати початок відліку часу, щоб $t_1 = 0$, $t_2 -$

$t_1 = t$, і тоді одержимо автокореляційну функцію у вигляді (2).

У випадку ж кластера з невеликою кількістю атомів, які пов'язані пружними силами і коливаються, ця функція залежить від t_1 і t_2, а не від їхньої різниці. Це можна легко бачити на прикладі одного гармонічного осцилятора ($N = 1$). В цьому випадку $V_2(t_1, t_2) = \mathbf{v}(t_1)\mathbf{v}(t_2)$ залежить як від t_2, так і від t_1, оскільки визначальним тут є не різниця фаз, а фази коливань у моменти t_1 і t_2.

Оскільки ми розглядаємо саме кластери з осцилюючими атомами, то виникає проблема вибору t_1 чи усереднення за t_1, яка буде обговорена нижче.

Основна наша мета — визначення за допомогою автокореляційних функцій швидкости спектра частот коливань атомів у кристалі. В основі цього підходу є той факт, що Фур'є–зображення цієї функції визначає спектральний розподіл коливань $g(\omega)$ [9].

У розділі II знайдено аналітичний вираз для автокореляційної функції швидкости лінійного замкнутого ланцюжка і показано, що її Фур'є–зображення визначає частоти нормальних коливань.

У розділі III модель розділу II розраховано методом молекулярної динаміки, а також розраховано більш складну модель.

II. АВТОКОРЕЛЯЦІЙНА ФУНКЦІЯ ШВИДКОСТИ ЛІНІЙНОГО ЗАМКНУТОГО ЛАНЦЮЖКА

Розглянемо спочатку один гармонічний осцилятор, який взаємодіє з термостатом при температурі T.

Автокореляційна функція швидкости в цьому випадку має вигляд

$$V_2(t_0, t) = \langle v(t_0) v(t_0 + t) \rangle, \tag{3}$$

де $\langle ... \rangle$ — термодинамічне усереднення.

Запишемо $v(t_0)$ у вигляді

$$v(t_0) = v_{\max} \cos(\omega_0 t_0 + \phi_0). \tag{4}$$

Такий запис означає, що початок відліку часу вибрано так, що при $t_0 = 0$ початкова фаза дорівнює ϕ_0. Для того, щоб вираз (3) не залежав від вибору початку відліку часу, його слід усереднити за t_0, або, що те саме за ϕ_0. Оскільки кожна з величин: t_0 і ϕ_0, визначає вибір початку відліку часу, одну з них можна прийняти такою, що дорівнює нулю, а за другою усереднити. Позначимо рискою над $V_2(t_0, t)$ усереднення за t_0 за період коливань τ чи за ϕ_0 за період 2π.

Тоді

$$\overline{V_2(t_0, t)} = \langle v_{\max}^2 \rangle \frac{1}{\tau} \int\limits_0^\tau \cos\omega_0 t_0 \cos\omega_0 (t_0 + t) dt_0 \tag{5}$$

$$= \langle v_{\max}^2 \rangle \frac{1}{2\pi} \int\limits_0^{2\pi} \cos\phi_0 \cos(\omega_0 t + \phi_0) d\phi_0$$

$$= \frac{\langle v_{\max}^2 \rangle}{2} \cos\omega_0 t.$$

Зазначимо, що цей самий результат можна одержати, якщо в (3) і (4) прийняти $t_0 = \phi_0 = 0$ і означити

$$V_2(t) = \langle v(0) v(t) \rangle, v(t) = v(0) \cos\omega_0 t.$$

Тоді

$$V_2(t) = \langle v(0)^2 \rangle \cos\omega_0 t. \tag{6}$$

Цей вираз збігається з (5), якщо врахувати, що внаслідок довільности вибору моменту часу 0

$$\langle v(0)^2 \rangle = \langle v^2 \rangle = \frac{\langle v_{max}^2 \rangle}{2} = \frac{k_B T}{m}. \tag{7}$$

Таким чином можна у виразі для автокореляційної функції вважати з самого початку, що $t_0 = 0$, оскільки подальше термодинамічне усереднення автоматично виконує усереднення і за t_0, згідно з (7).

Отже, автокореляційна функція гармонічного осцилятора

$$V_2(t) = \overline{V_2(t_0, t)} = \frac{k_B T}{m} \cos\omega_0 t. \tag{8}$$

Фур'є–зображення цієї функції

$$F(\omega) = \frac{2}{\pi} \int\limits_0^\infty V_2(t) \cos\omega t dt$$

$$= \frac{2 k_B T}{\pi m} \int\limits_0^\infty \cos\omega_0 t \cos\omega t dt. \tag{9}$$

Інтеграл у (9) можна обчислити, якщо записати його так:

$$J = \int\limits_0^\infty \cos\omega_0 t \cos\omega t dt$$

$$= \lim_{\alpha \to 0} \int\limits_0^\infty e^{-\alpha t^2} \cos\omega_0 t \cos\omega t dt$$

$$= \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon}} exp \left\{ -\frac{(\omega - \omega_0)^2}{\varepsilon} \right\},$$

де $\varepsilon = 4\alpha$.

Останній вираз є не що інше, як одне із визначень δ-функції Дірака (помноженої на $\pi/2$).

Отже, маємо

$$F(\omega) = \frac{k_B T}{m} g(\omega), \tag{10}$$

де

$$g(\omega) = \delta(\omega - \omega_0) \tag{11}$$

— нормована на одиницю густина коливань гармонічного осцилятора.

Цей приклад ілюструє зв'язок Фур'є–зображення автокореляційної функції з густиною коливань.

Розглянемо далі замкнутий лінійний ланцюжок з N атомів з масами m_i пов'язаних між собою квазіпружними силами з коефіцієнтом жорсткости k.

Автокореляційна функція швидкости в цьому випадку

$$V_2(t_0, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle v_i(t_0) v_i(t_0 + t) \rangle. \tag{12}$$

Приймемо далі в (12) $t_0 = 0$ і усереднення будемо виконувати за фазами коливань.

Уведемо нормальні координати $Q_s(t) \quad (s = 1, 2, ..., N)$ за формулами:

$$x_i(t) = \sum_{s=1}^{N} C_{is} Q_s(t), \tag{13}$$

де $x_i(t)$ — зміщення з положення рівноваги i-ї частинки.

Тоді $V_2(0, t)$ запишемо:

$$V_2(0, t) = \frac{1}{N} \sum_{i,s,s'=1}^{N} C_{is} C_{is'} \langle \dot{Q}_s(0) \dot{Q}_{s'}(t) \rangle, \tag{14}$$

де

$$Q_s(t) = Q_s^0 \sin(\omega_s t + \phi_s), \tag{15}$$

$$\sum_{i=1}^{N} m_i C_{is} C_{is'} = \delta_{ss'}. \tag{16}$$

Обернене до (13) перетворення має вигляд

$$Q_s(t) = \sum_{i=1}^{N} b_{si} x_i(t). \tag{17}$$

Коефіцієнти b_{si} задовольняють співвідношення

$$\sum_{s=1}^{N} b_{si} b_{sk} = m_i \delta_{ik}, \tag{18}$$

$$\sum_{s=1}^{N} C_{is} b_{sk} = \delta_{ik}. \tag{19}$$

Величини Q_s^0 можна виразити через температуру термостата, записавши кінетичну енергію системи N частинок через нормальні координати. Якщо розглядати тільки коливні рухи системи, вилучивши можливість поступального руху системи, як цілого, то система з N частинок буде мати $N-1$ нормальних координат, відмінних від нуля. Якщо позначити нормальну координату, що відповідає поступальному рухові, через Q_1, то можна записати

$$\frac{1}{2} \sum_{s=2}^{N} \langle \dot{Q}_s^2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{s=2}^{N} \langle (Q_s^0)^2 \rangle \omega_s^2 \overline{\cos^2(\omega_s t + \phi_s)}$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{s=2}^{N} \langle (Q_s^0)^2 \rangle \omega_s^2 = (N-1) \frac{\Theta}{2},$$

де $\Theta = k_B T$.

Враховуючи рівномірний розподіл енергії за ступенями вільности, одержимо

$$\langle (Q_s^0)^2 \rangle = \frac{1}{\omega_s} \sqrt{2\Theta}, \quad (s = 2, 3, ..., N). \tag{20}$$

Розглянемо далі приклад замкнутого ланцюжка з чотирьох атомів з масами $m_1 = m_3 = m, \quad m_2 = m_4 = M \quad (m < M)$. У [10] були знайдені частоти нормальних коливань у цьому ланцюжку:

$$\omega_1 = 0, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{2k}{M}}, \quad \omega_3 = \sqrt{\frac{2k}{m}}, \quad \omega_4 = \sqrt{\frac{2k}{\bar{m}}}, \tag{21}$$

де $\bar{m} = \frac{mM}{m+M}$ — зведена маса; k — коефіцієнт пружності.

Нормальними координатами в цьому випадку є:

$$\begin{aligned} Q_1 &= \frac{1}{\sqrt{2(m+M)}} (m x_1 + M x_2 + m x_3 + M x_4), \\ Q_2 &= \sqrt{\frac{M}{2}} (x_2 - x_4), \\ Q_3 &= \sqrt{\frac{m}{2}} (x_1 - x_3), \\ Q_4 &= \sqrt{\frac{\bar{m}}{2}} (x_1 - x_2 + x_3 - x_4). \end{aligned} \tag{22}$$

Зміщення x_i виражаються через Q_i, згідно з (22), так:

$$
\begin{aligned}
x_1 &= \frac{1}{\sqrt{2(m+M)}}\left(Q_1 + \sqrt{\frac{m+M}{m}}Q_3 + \sqrt{\frac{M}{m}}Q_4\right), \\
x_2 &= \frac{1}{\sqrt{2(m+M)}}\left(Q_1 + \sqrt{\frac{m+M}{M}}Q_2 - \sqrt{\frac{m}{M}}Q_4\right), \\
x_3 &= \frac{1}{\sqrt{2(m+M)}}\left(Q_1 - \sqrt{\frac{m+M}{m}}Q_3 + \sqrt{\frac{M}{m}}Q_4\right), \\
x_4 &= \frac{1}{\sqrt{2(m+M)}}\left(Q_1 - \sqrt{\frac{m+M}{M}}Q_2 - \sqrt{\frac{m}{M}}Q_4\right).
\end{aligned}
\tag{23}
$$

Зміст нормальних координат Q_i в даному прикладі відразу видно з (22). А саме: Q_1 — координата, яка визначає зміщення центра мас; Q_2 — коливання важких атомів, якщо нерухомі легкі; Q_3 — легких, якщо нерухомі важкі; Q_4 — коливання пар важких і легких атомів відносно їхніх центрів мас.

Якщо розглядати лише коливні рухи в ланцюжку, вилучивши поступальний рух, який відповідає частоті $\omega_1 = 0$, то слід прийняти $Q_1 = 0$.

Формулу (14) тоді запишемо із урахуванням (15):

$$
V_2(0,t) = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4}\sum_{s,s'=2}^{4} C_{is}C_{is'}\langle Q_s^0 Q_{s'}^0\rangle \omega_s\omega_{s'}\overline{\cos\phi_s\cos(\omega_{s'}t+\phi_{s'})}. \tag{24}
$$

Враховуючи, що середні значення в (24) дорівнюють нулю при $s' \neq s$, величини, що усереднені в (24), набувають вигляду

$$
\overline{\cos\phi_s\cos(\omega_s t+\phi_s)} = \overline{\{\cos\phi_s\cos\omega_s t\cos\phi_s - \cos\phi_s\sin\omega_s t\sin\phi_s\}} = \frac{1}{2}\cos\omega_s t,
$$

оскільки у випадку усереднення за ϕ_s

$$
\overline{\cos^2\phi_s} = \frac{1}{2}, \qquad \overline{\cos\phi_s\sin\phi_s} = 0.
$$

Тоді (24) запишемо

$$
V_2(0,t) = \frac{1}{8}\sum_{i=1}^{4}\sum_{s=2}^{4} C_{is}^2\langle (Q_s^0)^2\rangle \omega_s^2\cos\omega_s t. \tag{25}
$$

Врахувавши (20) і вирази для C_{is} з (23), одержимо

$$
V_2(0,t) = \frac{\Theta}{4}\left(\frac{1}{M}\cos\omega_2 t + \frac{1}{m}\cos\omega_3 t + \bar{m}\left(\frac{1}{m^2}+\frac{1}{M^2}\right)\cos\omega_4 t\right). \tag{26}
$$

Кореляційна функція набуде простішого вигляду, якщо записати її для імпульсів $p_i = m_i\dot{x}_i$. Тоді замість (26) одержимо

$$
P_2(0,t) = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4}\langle p_i(0)p_i(t)\rangle = \frac{1}{4}\Theta(M\cos\omega_2 t + m\cos\omega_3 t + 2\bar{m}\cos\omega_4 t). \tag{27}
$$

Цей вираз є певним узагальненням на випадок різних мас відомої формули для автокореляційної функції простої кубічної ґратки [11]

$$\langle p_x(0)p_x(t)\rangle = \frac{M}{N}\Theta\sum_{\mathbf{k}}\cos\omega(\mathbf{k})t.$$

Фур'є–зображення функції $P_2(0,t)$ має вигляд

$$F(\omega) = \frac{\Theta}{4}\{M\delta(\omega-\omega_2) + m\delta(\omega-\omega_3) + 2\bar{m}\delta(\omega-\omega_4)\}. \tag{28}$$

У випадку числових розрахунків методом МД ця функція набуває вигляду сукупности піків. За їхнім розташуванням можна визначити частоти нормальних коливань, а за їхньою площею, як видно з (28), можна з'ясувати, з коливаннями яких саме атомів пов'язана ця частота.

III. РОЗРАХУНОК АВТОКОРЕЛЯЦІЙНОЇ ФУНКЦІЇ ШВИДКОСТИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

Для відшукання автокореляційних функцій швидкості методом МД необхідно перш за все розв'язати систему рівнянь руху N частинок і визначити з неї швидкости всіх частинок як функції часу та початкових значень координат і швидкостей.

Тоді автокореляційну функцію швидкости для системи N частинок можна визначити за формулою

$$V_2(0,t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle \dot{x}_i(0;x_1(0)x_2(0)...x_N(0);\dot{x}_1(0)\dot{x}_2(0)...\dot{x}_N(0)\dot{x}_i(t;x_1(0)...x_N(0);\dot{x}_1(0)...\dot{x}_N(0))\rangle. \tag{29}$$

Усереднення у формулі (29) слід виконувати за всіма можливими значеннями початкових положень і швидкостей частинок. Оскільки під час коливного руху швидкості і положення частинок пов'язані між собою, то можна вважати у початковий момент часу всі зміщення такими, що дорівнюють нулю, а швидкості визначити із їхніх середньоквадратичних значень, які пов'язані з температурою.

Для випадку N частинок формулу (28) можна записати у вигляді

$$F(\Omega) = \frac{\Theta}{N}\sum_{s=2}^{N}\mathcal{M}_s\delta(\Omega-\Omega_3), \tag{30}$$

де $\Omega_s = \omega_s/\omega_N$, ω_N — максимальне значення частоти оптичної гілки,

$$\mathcal{M}_s = \frac{2\Omega_s^2}{\bar{m}}\sum_{i=1}^{N}m_i^2A_{is}^2, \tag{31}$$

A_{is} — безрозмірна амплітуда зміщення i-го атома зумовленого s-ю модою коливань. Вони пов'язані з коефіцієнтами C_{is}, визначеними в (13): $A_{is} = \frac{\sqrt{k}}{\omega_s}C_{is}$. З умови нормування (16) випливає

$$\frac{\omega_s^2}{k}\sum_{i=1}^{N}m_iA_{is}^2 = 1. \tag{32}$$

Для порівняння методів автокореляційної функції і діягоналізації динамічної матриці були знайдені власні значення і власні вектори C_{is} динамічної матриці.

Обчислені значення власних частот Ω_s і величини A_{is} для випадку $N = 8$ і $m = 0.5M$ наведено в таблиці:

	i	1	2	3	4	5	6	7	8
s	$\Omega_s^2 \backslash m_i$	m	M	m	M	m	M	m	M
2	0.13	0	-0.49	-0.6	-0.49	0	0.49	0.6	0.49
3	0.13	-0.6	-0.49	0	0.49	0.6	0.49	0	-0.49
4	0.33	0	0.35	0	-0.35	0	0.35	0	-0.35
5	0.67	-0.35	0	0.35	0	-0.35	0	0.35	0
6	0.87	0	0.11	-0.37	0.11	0	-0.11	0.37	-0.11
7	0.87	0.37	-0.11	0	0.11	-0.37	0.11	0	-0.11
8	1	0.24	-0.12	0.24	-0.12	0.24	-0.12	0.24	-0.12

На рис. 1 і 2 показано графіки функції $\mathcal{F}(\Omega) = NF(\Omega)/\Theta\mathcal{M}_N$ для $N = 4$ і $N = 8$.

Площі піків на рисунках дорівнюють $\mathcal{M}_s/\mathcal{M}_N$. Із величин цих площ можна визначити характер коливань, які належать тій чи іншій моді нормальних коливань. Одержані значення частот Ω_s збігаються зі значеннями, наведеними в таблиці. Величина площ піків також узгоджується із значеннями, одержаними з формули (31), якщо використати величини A_{is} з таблиці.

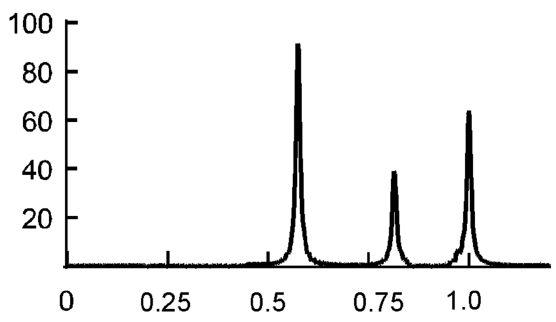

Рис. 1. Графік функції $\mathcal{F}(\Omega)$ для $N = 4$, $m/M = 0.5$.

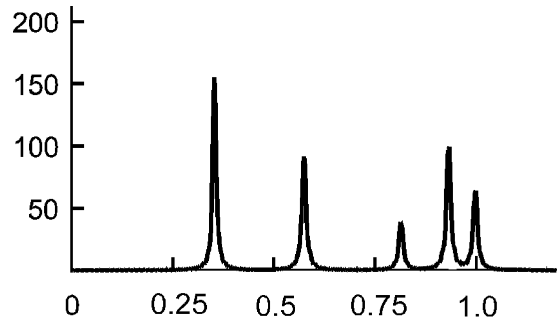

Рис. 2. Графік функції $\mathcal{F}(\Omega)$ для $N = 8$, $m/M = 0.5$.

Отже, метод автокореляційної функції швидкости дає змогу обчислити власні частоти коливань атомів. Він може мати переваги над звичайним методом діягоналізіції матриці, якщо розглядають великі кластери у тривимірному випадку.

[1] L. van Hove, Phys. Rev. **95**, 249 (1954).

[2] B. J. Alder, T. Wainwright, J. Chem. Phys. **27**, 1209 (1957).

[3] А. Н. Лагарьков, В. М. Сергеев, Усп. физ. наук **125**, 409 (1978).

[4] Х. Гулд, Я. Тобочник, *Компьютерное моделирование в физике, ч. 1, 2* (Мир, Москва, 1990)

[5] J. X. Yang, J. Koplik, J. R. Banavar, Phys. Rev. A **46**, 7738, (1992).

[6] J. Nieminen, D. B. Abraham, M. Karttunen, K. Kaski, Phys. Rev. Lett. **69**, 124 (1992).

[7] K. Kaski, Europhys. News **26**, 23 (1995).

[8] A. Rahman, Phys. Rev. A **136**, 405 (1964).

[9] A. Rahman, K. S. Singwi, A. Sjölander, Phys. Rev. **126**, 986 (1962).

[10] I. I. Тальянський, Журн. фіз. досл. **1**, 106 (1996).

[11] А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вяйсс, *Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении* (Мир, Москва, 1965).

TIME DEPENDENT VELOCITY AUTOCORRELATION FUNCTIONS OF CLUSTERS WITH CYCLIC BOUNDARY CONDITIONS

I. I. Talyansky, A. T. Maksymov

Lviv State University, Chair for Theoretical Physics

12 Drahomanov Str., Lviv, UA–290005, Ukraine

The possibility of molecular dynamics usage for the calculation of vibrational spectra of crystals has been studied. The basis of this approach is the fact that Fonrier transform of velocity autocorrelation function defines the density of vibrational states. In the proposed work an analytical expression of the autocorrelation function and its Fourier transform have been found in approach of a linear chain with the cyclic boundary conditions of two kinds of atoms (model of ionic crystal). The molecular dynamics simulation of this model has been performed. The curve of the Fourier transform includes a number of sharp peaks, whose positions define the frequency of the normal vibrational modes and their areas correspond to the masses that are vibrating with these modes. Vibrations of chains (clusters) with the number of atoms N equal to 4 and 8 have been investigated. In the case of $N = 4$ the results have been compared with the analytical expression. For $N = 8$ the molecular dynamics results have been compared with the corresponding results obtained by the diagonalization of a dynamical matrix. A complete agreement of the results of comparison has been observed, which shows a possibility to use the molecular dynamics technique for the calculations of the vibrational spectra of crystals.