

BzScope: 高精度计算绝对量级非弹性中子散射谱的新型软件包

Wednesday, 27 August 2025 15:00 (20 minutes)

中子动力学结构因子 $S(Q, \omega)$ 的计算是利用非弹性中子散射 (INS) 技术研究材料动力学性质的基础，其中低阶相干声子的贡献尤为重要。传统的计算软件通常使用非相干近似来近似相干散射，并采用常规的采样方法在中子和声子的动量空间进行采样，导致计算结果的精度和分辨率有限。

BzScope 是中国散裂中子源 (CSNS) 开发的一种新型计算工具，旨在通过提供绝对强度的高精度动力学结构因子来应对这些挑战。BzScope 基于简谐近似理论，从晶体结构和力常数出发计算声子谱和中子-声子散射谱。BzScope 采用了一种新的无超参数自适应采样策略，在高维空间中对声子和中子的动量进行采样，从而能够在较广的中子动量转移范围内 ($0 \sim 100 \text{\AA}^{-1}$) 精确计算单声子、两声子相干事件的贡献，显著提高计算散射谱的分辨率，并保持优秀的数值稳定性。BzScope 可扩展到 N 声子相干计算，同时支持温度效应。

BzScope 可以独立使用，计算晶体的中子动力学结构因子，也可以通过插件与热中子输运软件 NCrystal 集成，计算中子散射微分截面和总截面。BzScope 可与双模式蒙特卡洛引擎 Prompt 集成，模拟完整的 INS 实验，从而连接计算和实验。BzScope 还可以直接使用 Phonopy 在线声子数据库。

BzScope 基准测试结果与现有软件和实验观测结果一致。BzScope 目前适用于晶体粉末样品，未来将增加对单晶样品和磁散射的支持。

Summary

Primary authors: YANG, Ni (Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences); 唐, 明 (高能所); 蔡, 晓晓 (高能所); 潘, 梓毅

Presenter: 唐, 明 (高能所)

Session Classification: 数据处理软件与分析方法

Track Classification: 数据处理软件与分析方法