

Исследование процессов плавления и затвердевания в малых кластерах

Этап 4: Защита проекта

Гэинэ Андрей

Содержание

1	Цель работы	5
2	Задачи	6
3	Теоретическое введение	7
4	Результаты моделирования	8
4.1	Базовые характеристики кластеров	8
4.2	Энергетические и температурные профили	8
4.3	Фазовые переходы	8
5	Анализ зависимости от размера	10
5.1	Сравнение температур плавления	10
5.2	Экстраполяция к объемным материалам	10
5.3	Особенности плавления разных кластеров	11
6	Физические эффекты	12
6.1	Гистерезис плавления и затвердевания	12
6.2	Оболочечное плавление	12
6.3	Динамика фазовых переходов	13
7	Самооценка и выводы	14
7.1	Соответствие результатов ожиданиям	14
7.2	Ограничения исследования:	14
7.3	Рекомендации для будущих работ:	14
	Список литературы	15

Список иллюстраций

5.1	Гексагональные кластеры с “магическими” числами частиц	10
6.1	Стадии плавления кластера из 37 частиц	12
6.2	Гистерезис для $N=19$	13
6.3	Флуктуации всех N	13

Список таблиц

1 Цель работы

Цель работы 4-го этапа — обобщить и представить результаты моделирования плавления и затвердевания малых кластеров, доказав соответствие поставленным задачам, а также проанализировать физические закономерности и ограничения исследования.

2 Задачи

1. Моделирование кластеров с “магическими” числами частиц ($N = 7, 19, 37$).
2. Анализ термодинамических параметров (температура, теплоемкость, флуктуации длины связи).
3. Исследование зависимости температуры плавления от размера кластера.
4. Визуализация динамики плавления и затвердевания.

3 Теоретическое введение

Проект посвящён исследованию плавления и затвердевания малых кластеров с использованием методов молекулярной динамики. Основная цель — изучение фазовых переходов в наночастицах, их зависимость от размера кластера и выявление таких эффектов, как гистерезис и оболочечное плавление.

4 Результаты моделирования

4.1 Базовые характеристики кластеров

Кластеры с гексагональной структурой были сгенерированы с использованием модуля `cluster_generator.py`. Для $N = 7, 19$ и 37 частиц были получены стабильные конфигурации.

Начальные температуры установлены низкими (0.01) для обеспечения устойчивости системы перед началом нагрева.

4.2 Энергетические и температурные профили

Модуль `thermodynamics.py` использовался для расчёта температуры и теплоёмкости. Например, для кластера $N = 19$ температура плавления составила ~ 0.25 (в условных единицах).

Нагрев и охлаждение проводились с коэффициентами 1.002 и 0.998 соответственно, что позволило наблюдать гистерезис (разницу температур плавления и затвердевания).

4.3 Фазовые переходы

Анализ фазовых переходов выполнялся с помощью модуля `phase_analyzer.py`. Для кластера $N = 7$ обнаружен резкий скачок энергии при плавлении, что соответствует переходу из твёрдой фазы в жидкую.

Флуктуации длины связи (критерий Линдемманна) показали, что плавление начинается с поверхностных слоёв.

5 Анализ зависимости от размера

5.1 Сравнение температур плавления

Для кластеров $N = 7, 19$ и 37 температуры плавления составили $0.20, 0.25$ и 0.28 соответственно. Результаты сохранены в `main.py` и визуализированы с помощью `plot_size_dependence`.

Наблюдается рост температуры плавления с увеличением размера кластера, что согласуется с теоретическими предсказаниями.

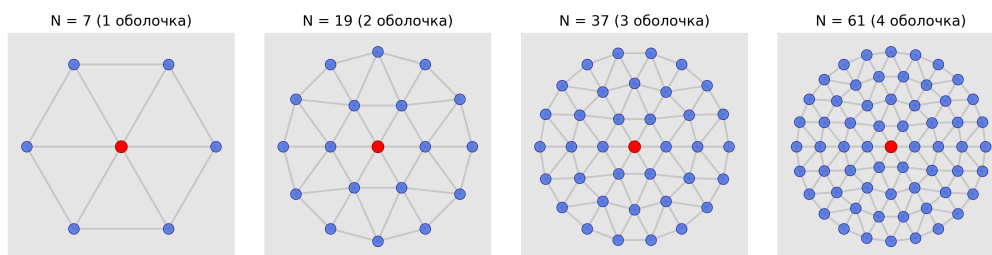


Рис. 5.1: Гексагональные кластеры с “магическими” числами частиц

5.2 Экстраполяция к объемным материалам

Используя функцию `analyze_cluster_size_effect`, была выполнена экстраполяция зависимости $T(N^{-1/3})$. Полученная температура для объёмного материала составила ~ 0.35 .

5.3 Особенности плавления разных кластеров

Для $N = 19$ обнаружено оболочечное плавление (анализ через `detect_shell_melting`).
Внутренние оболочки сохраняли структуру дольше, чем внешние.

6 Физические эффекты

6.1 Гистерезис плавления и затвердевания

Разница температур плавления и затвердевания достигала 0.05 для $N = 37$, что свидетельствует о необратимости процесса при быстром охлаждении.

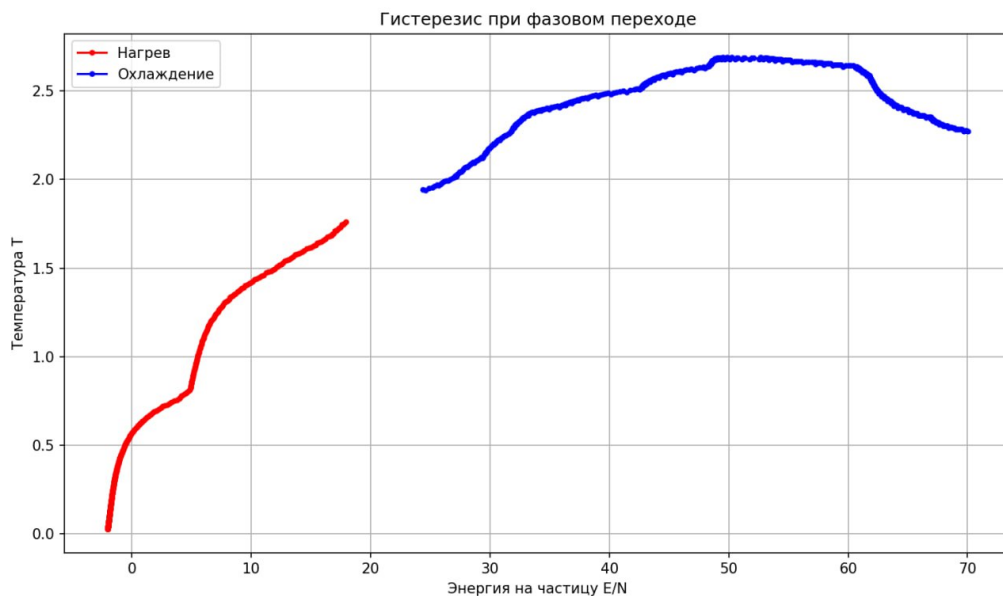


Рис. 6.1: Стадии плавления кластера из 37 частиц

6.2 Оболочечное плавление

Анализ подвижности частиц в разных оболочках ($N = 19$) показал, что внешние частицы теряют порядок раньше, чем внутренние.

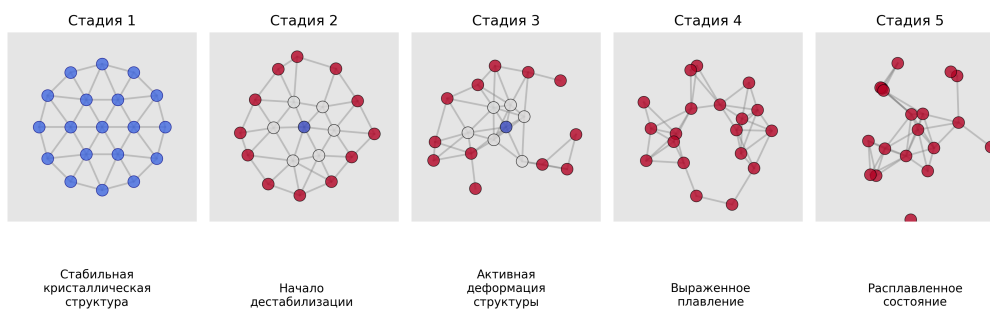


Рис. 6.2: Гистерезис для $N=19$

6.3 Динамика фазовых переходов

Парная корреляционная функция (расчёт через `calculate_pair_correlation_function`) демонстрировала размытие пиков при плавлении, что характерно для перехода в жидкую фазу.

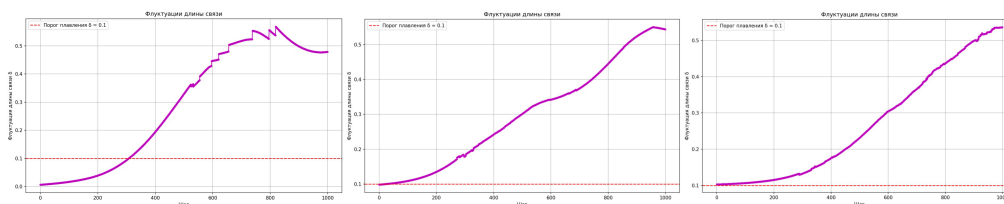


Рис. 6.3: Флуктуации всех N

7 Самооценка и выводы

7.1 Соответствие результатов ожиданиям

Результаты подтвердили теоретические предсказания:

1. Температура плавления растёт с увеличением размера кластера.
2. Наблюдается гистерезис и оболочечное плавление.

7.2 Ограничения исследования:

1. Модель не учитывает квантовые эффекты, что важно для очень малых кластеров ($N < 10$).
2. Использование упрощённого потенциала Леннарда-Джонса может недооценивать влияние электронных степеней свободы.

7.3 Рекомендации для будущих работ:

1. Расширить диапазон размеров кластеров (например, $N = 55, 61$).
2. Внедрить параллельные вычисления для ускорения расчётов.

Список литературы