

Исследование процессов плавления и затвердевания в малых кластерах

Этап 3. Комплексы программ

Шилоносов Данил Вячеславович

05 мая 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Информация

- Шилоносов Данил Вячеславович
- студент группы НФИбд-02-22
- Факультет физико-математических и естественных наук
- Российский университет дружбы народов
- 1132221810@pfur.ru

Вводная часть

- Малые кластеры проявляют уникальные физические и термодинамические свойства
- Фазовый переход в наноразмерных системах отличается от объемных материалов
- Компьютерное моделирование позволяет изучать неравновесные процессы и метастабильные состояния
- Методы молекулярной динамики дают детальное представление о механизмах плавления на атомном уровне

- **Объект исследования:** малые двумерные кластеры с “магическими” числами частиц (7, 19, 37, 61)
- **Предмет исследования:** программная реализация методов моделирования, анализа и визуализации процессов плавления и затвердевания

Цель: Разработка программного комплекса для моделирования термодинамических свойств и фазовых переходов в малых кластерах

Задачи: - Реализовать модуль генерации кластеров с гексагональной структурой -
Разработать движок молекулярной динамики с интегрированием по алгоритму Верле -
Создать модули расчета термодинамических характеристик и фазовых переходов -
Реализовать средства визуализации результатов моделирования

Язык программирования и библиотеки: - Python 3 с NumPy, SciPy, Matplotlib, tqdm

Методы численного моделирования: - Алгоритм Верле в скоростной форме для интегрирования уравнений движения - Потенциал Леннард-Джонса для взаимодействия частиц - Термостатирование через масштабирование скоростей

Архитектура программного комплекса

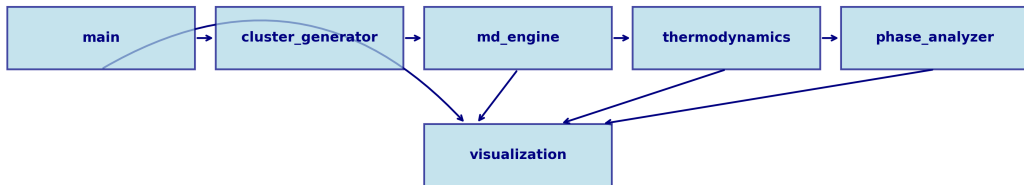


Рис. 1: Структура программного комплекса

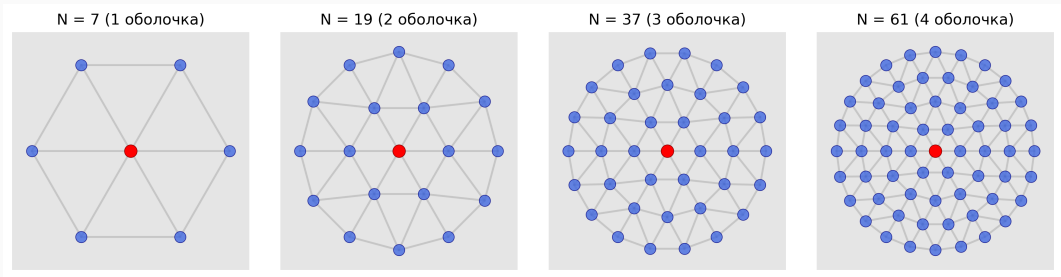


Рис. 2: Гексагональные кластеры с “магическими” числами частиц

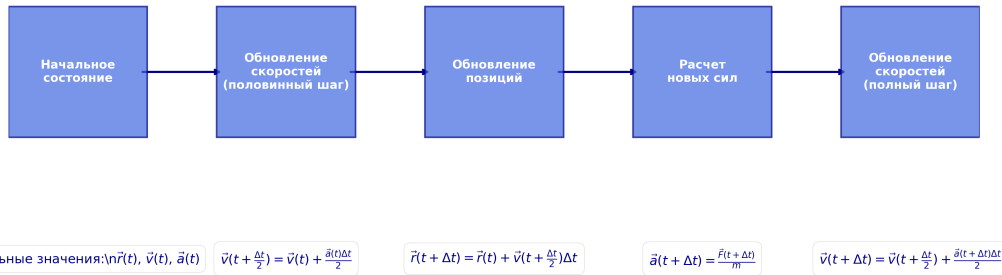


Рис. 3: Алгоритм Верле в скоростной форме

Потенциал Леннард-Джонса

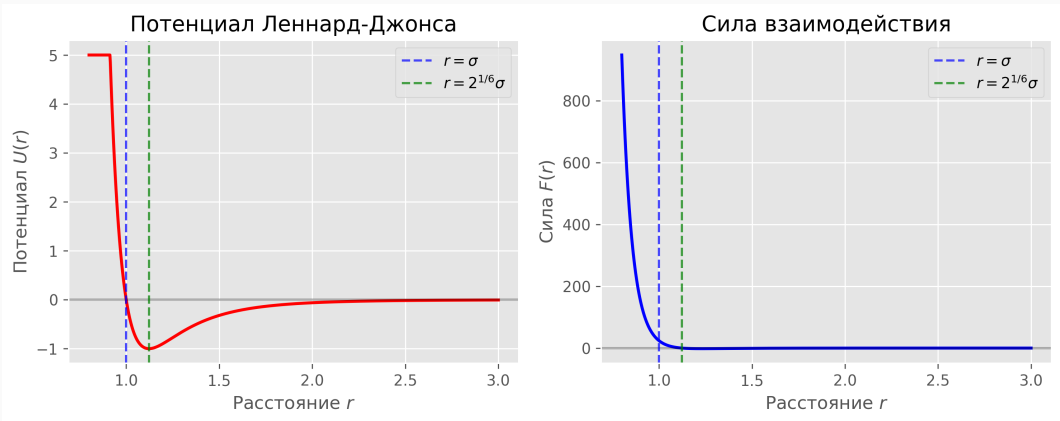


Рис. 4: Потенциал и сила Леннарда-Джонса

Функции в модуле `thermodynamics.py`:

- Расчет температуры системы
- Вычисление флуктуаций длины связи (критерий Линдемманна)
- Расчет парной корреляционной функции
- Вычисление теплоемкости



Рис. 5: Фазовый переход и теплоемкость

Описание процесса моделирования

1. Инициализация системы:

- Создание кластера с заданным числом частиц
- Установка начальных скоростей с низкой температурой

2. Уравновешивание, нагрев и охлаждение системы:

- Уравновешивание без масштабирования скоростей
- Нагрев через постепенное увеличение скоростей
- Охлаждение начиная с последнего состояния нагрева

3. Анализ результатов:

- Определение температуры плавления/затвердевания
- Расчет термодинамических характеристик
- Анализ гистерезиса и оболочечного плавления

Параметры алгоритма:

- Шаги уравнивания: 100
- Шаги нагрева/охлаждения: 500
- Шаг по времени (dt): 0.0005
- Коэффициент нагрева: 1.002
- Коэффициент охлаждения: 0.998

Размеры кластеров: - 7, 19, 37, 61 частиц (1-4 оболочки)

Параметры потенциала:

- Глубина ямы (ϵ): 1.0
- Равновесное расстояние (b): 1.0
- Радиус обрезания: $2.5 \cdot b$

Оптимизации: - Макс. ускорение: 20.0 - Макс. скорость: 3.0 - Мин. расстояние: $0.2 \cdot b$ - Сглаживание данных при анализе

Стадии плавления кластера

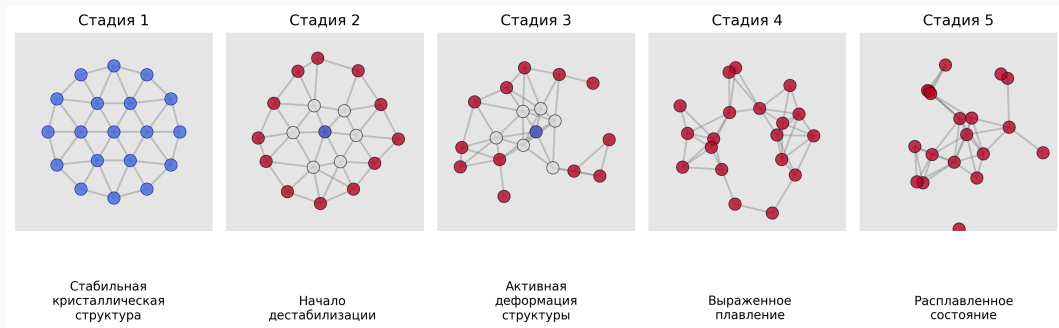


Рис. 6: Стадии плавления кластера из 19 частиц

Результаты и выводы

1. Разработан комплекс программ для моделирования процессов плавления и затвердевания
 - генерация кластеров с “магическими” числами частиц
 - моделирование динамики частиц
 - расчет термодинамических характеристик
 - анализ фазовых переходов
 - визуализация результатов
2. Реализована система обнаружения фазовых переходов по различным критериям
 - теплоемкость, флуктуации длины связи, гистерезис, оболочечное плавление

Модульная структура программного комплекса: - Гибкость в использовании отдельных компонентов - Возможность расширения функциональности - Удобная настройка параметров моделирования - Независимое тестирование и отладка каждого модуля

Особенности фазовых переходов в наносистемах: - Зависимость температуры плавления от размера кластера - Наличие гистерезиса между нагревом и охлаждением - Явление оболочечного плавления

Расширение функциональности программного комплекса: - Трёхмерное моделирование -
Другие потенциалы взаимодействия - Интеграция методов квантовой химии -
Параллелизация вычислений

Улучшение анализа фазовых переходов: - Дополнительные методы определения точки
фазового перехода - Анализ локальной структуры в переходной области - Изучение
кинетики плавления и затвердевания

1. Медведев Д. А., Куперштох А. Л., Прууэл Э. Р., Сатонкина Н. П., Карпов Д. И. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие / Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т., 2010. — 101 с.