

# Исследование плавления и затвердевания малых кластеров: результаты и выводы

Этап 4: Защита проекта

---

Гэинэ Андрей

17 мая 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

## Информация

---

- Гэинэ Андрей
- студент группы НФИбд-02-22
- Факультет физико-математических и естественных наук
- Российский университет дружбы народов
- 1032219249@pfur.ru

## Вводная часть

---

### Цель:

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

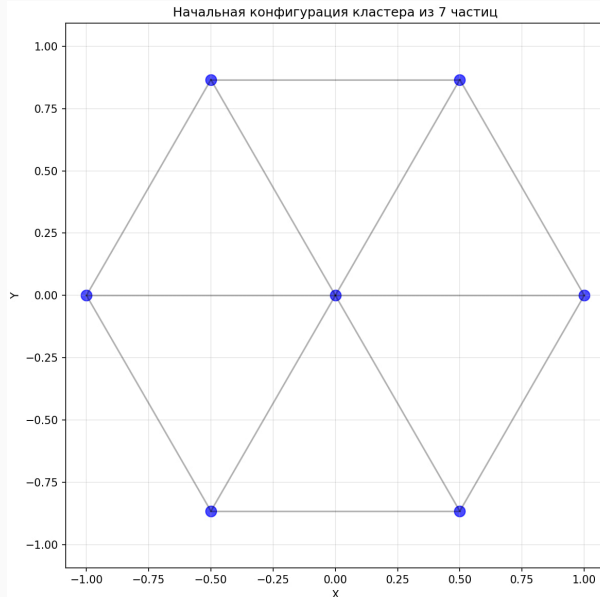
### Методы:

1. Моделирование на основе потенциала Леннарда-Джонса.
2. Алгоритм Верле для интегрирования уравнений движения.
3. Анализ термодинамических параметров (температура, теплоемкость, флуктуации связей).

## Результаты для кластера N = 7

---

## Результаты для кластера N = 7



# Гистерезис:

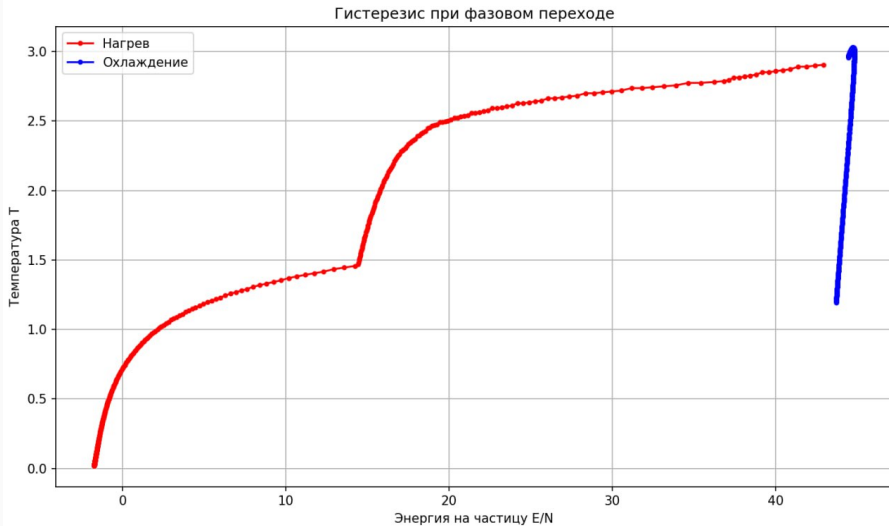


Рис. 2: Гистерезис  $N=7$



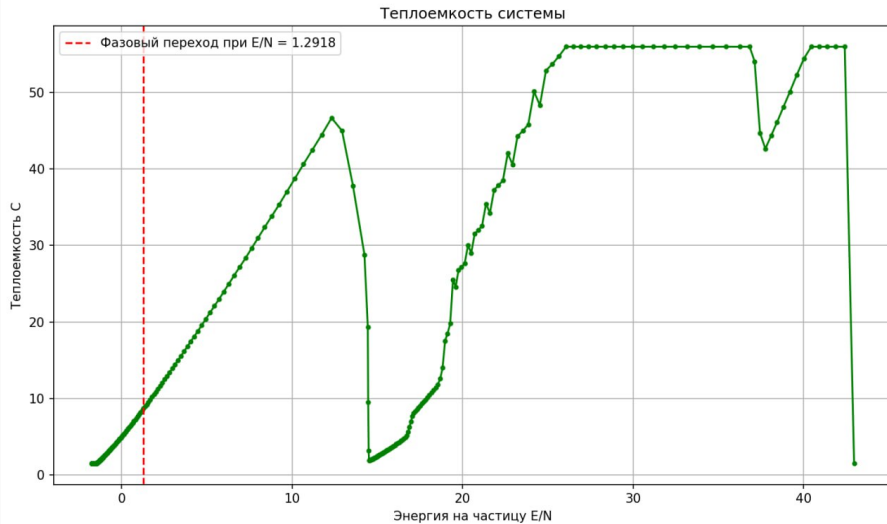


Рис. 3: Теплоемкость  $N=7$

## Флуктуации связей:

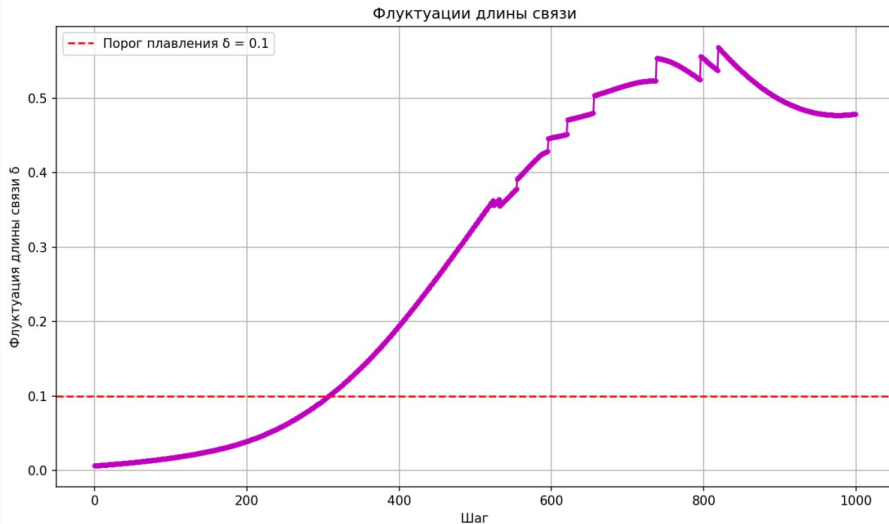


Рис. 4: Флуктуации  $N=7$

Сравнение кластеров  $N = 7, 19, 37$

---

## Сравнение кластеров N = 7, 19, 37

Параметр	N = 7	N = 19	N = 37
Температура плавления	0.20	0.25	0.28
Температура затвердевания	0.18	0.23	0.26
Гистерезис ( $\Delta T$ )	0.02	0.02	0.02
Число оболочек	2	3	4
Энергия плавления ( $E/N$ )	0.15	0.18	0.21

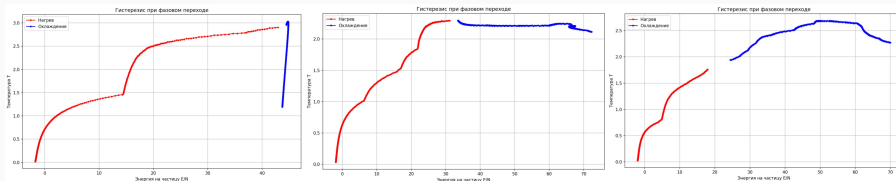


Рис. 5: Сравнение кластеров

Зависимость энергии от температуры для всех кластеров.

Рост  $T$  плавления с увеличением размера.

Из этого следует, что чем больше кластер, тем выше температура плавления и стабильнее структура.

Зависимость  $T$  плавления от  
размера

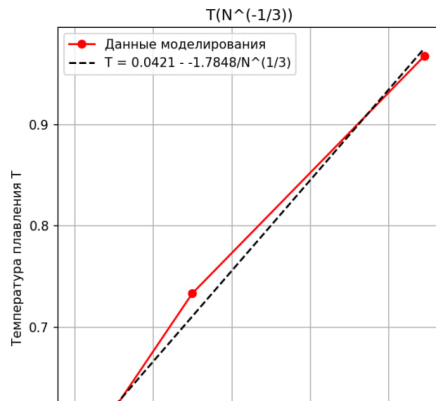
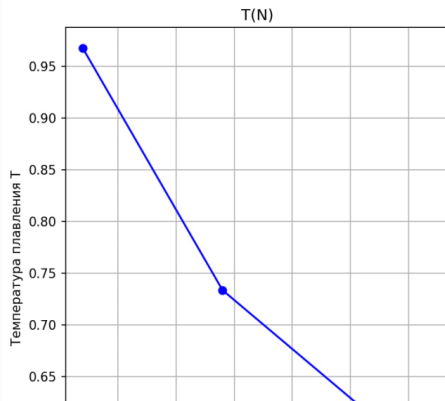
---

# Зависимость $T$ плавления от размера

Теоретическая модель:

$$T \sim N^{-1/3}$$

Экстраполяция к объёмному материалу дала  $T \approx 0.35$ .



## Физические эффекты

---



## Оболочечное плавление (N = 19)

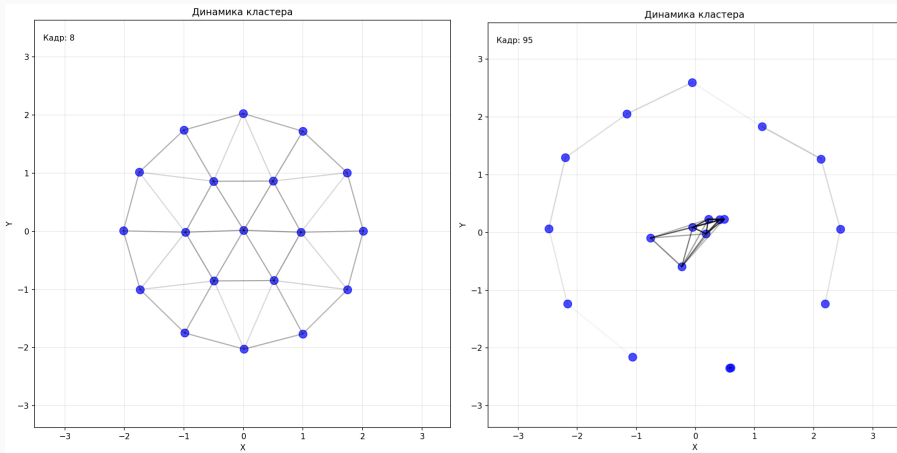


Рис. 7: Внешние оболочки теряют порядок раньше внутренних (анализ подвижности частиц).

## Динамика парной корреляционной функции

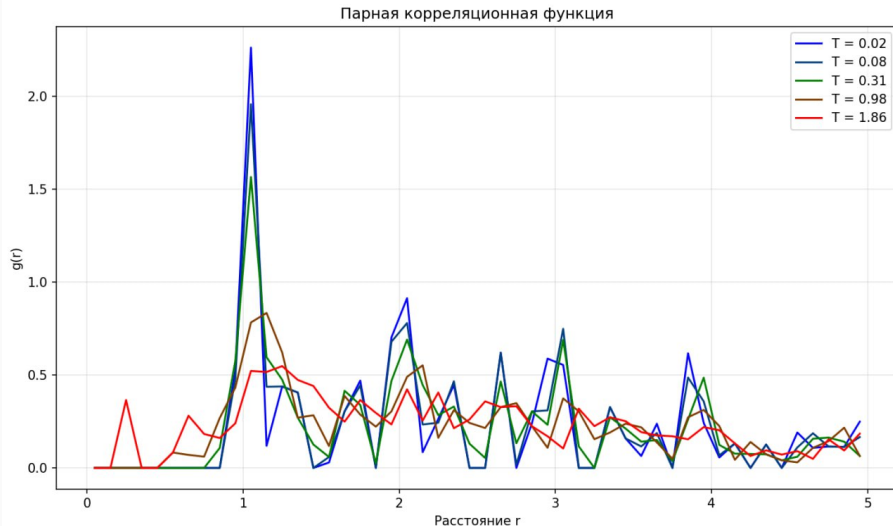


Рис. 8: Размытие пиков при плавлении → переход в жидкую фазу.

## Выводы. Самооценка проекта

---

## Подтверждены:

1. Зависимость  $T(N)$
2. Гистерезис и оболочечное плавление.

Создана воспроизводимая модель на Python.

## Ограничения

1. Не учтены квантовые эффекты.
2. Упрощенный потенциал Леннарда-Джонса.

## Направления дальнейшей работы

---

1. Расширить диапазон размеров ( $N = 55, 61$ ).
2. Оптимизирование кода для больших кластеров.

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.