

Отчет по этапу 3 проекта

Комплексы программ

Шилоносов Данил Вячеславович

Содержание

1	Цель работы	5
2	Задачи	6
3	Теоретическое введение	7
4	Архитектура программного комплекса	8
4.1	Модуль генерации кластеров	9
4.2	Движок молекулярной динамики	9
4.3	Потенциал Леннард-Джонса	10
4.4	Модуль термодинамики	11
4.5	Модуль анализа фазовых переходов	12
5	Процесс моделирования	13
5.1	Стадии плавления кластера	14
6	Выводы	16
	Список литературы	17

Список иллюстраций

4.1	Структура программного комплекса	8
4.2	Гексагональные кластеры с “магическими” числами частиц	9
4.3	Алгоритм Верле в скоростной форме	10
4.4	Потенциал и сила Леннард-Джонса	11
4.5	Фазовый переход и теплоемкость	12
5.1	Стадии плавления кластера из 19 частиц	14

Список таблиц

1 Цель работы

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

2 Задачи

1. Реализовать модуль генерации кластеров с гексагональной структурой
2. Разработать движок молекулярной динамики с интегрированием по алгоритму Верле
3. Создать модули расчета термодинамических характеристик и фазовых переходов
4. Реализовать средства визуализации результатов моделирования

3 Теоретическое введение

Малые кластеры представляют собой группы частиц (атомов или молекул) размером от нескольких единиц до нескольких тысяч. Они проявляют физические и термодинамические свойства, которые существенно отличаются как от свойств одиночных атомов, так и от свойств объемных материалов.

В данной работе рассматриваются двумерные кластеры с “магическими” числами частиц (7, 19, 37, 61), обладающие гексагональной структурой. Такие кластеры характеризуются повышенной стабильностью благодаря своей симметричной структуре.

Для исследования процессов плавления и затвердевания в кластерах применяются методы молекулярной динамики, позволяющие получить детальное представление о механизмах фазовых переходов на атомном уровне.

4 Архитектура программного комплекса

Разработанный программный комплекс имеет модульную архитектуру, состоящую из нескольких взаимосвязанных компонентов (рис. 4.1).

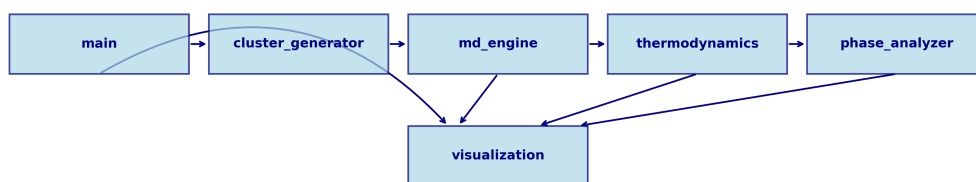


Рис. 4.1: Структура программного комплекса

Основные модули программного комплекса:

1. **main** - центральный модуль, координирующий работу всей программы
2. **cluster_generator** - создание начальных конфигураций кластеров
3. **md_engine** - движок молекулярной динамики с алгоритмом Верле
4. **thermodynamics** - расчет термодинамических характеристик системы
5. **phase_analyzer** - анализ фазовых переходов и параметров плавления
6. **visualization** - визуализация результатов моделирования

4.1 Модуль генерации кластеров

Модуль `cluster_generator.py` отвечает за создание двумерных кластеров с гексагональной структурой и “магическими” числами частиц. На рис. 4.2 показаны кластеры с 7, 19, 37 и 61 частицей, что соответствует 1, 2, 3 и 4 заполненным оболочкам вокруг центральной частицы.

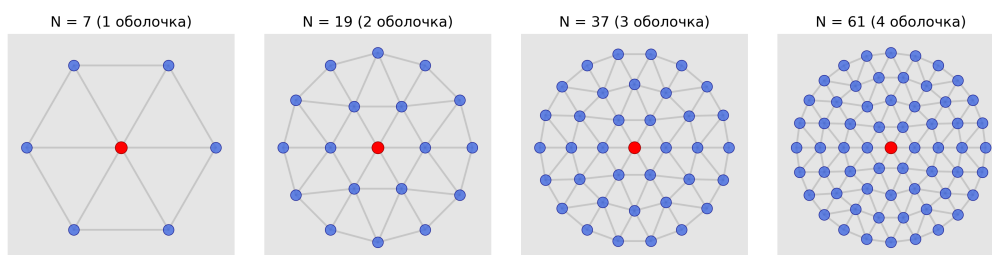


Рис. 4.2: Гексагональные кластеры с “магическими” числами частиц

“Магическое” число частиц для гексагональной структуры с количеством оболочек n вычисляется по формуле:

$$N = 1 + 3n(n + 1)$$

4.2 Движок молекулярной динамики

Ключевым компонентом моделирования является модуль `md_engine.py`, реализующий интегрирование уравнений движения с использованием алгоритма Верле в скоростной форме. Этот алгоритм обеспечивает хорошую точность и сохранение энергии системы.

Алгоритм Верле состоит из следующих шагов (рис. 4.3):

1. Обновление скоростей на половину шага:

$$\vec{v}(t + \frac{\Delta t}{2}) = \vec{v}(t) + \frac{\vec{a}(t)\Delta t}{2}$$

2. Обновление позиций:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t + \frac{\Delta t}{2})\Delta t$$

3. Расчет новых сил:

$$\vec{a}(t + \Delta t) = \frac{\vec{F}(t + \Delta t)}{m}$$

4. Обновление скоростей до полного шага:

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t + \frac{\Delta t}{2}) + \frac{\vec{a}(t + \Delta t)\Delta t}{2}$$

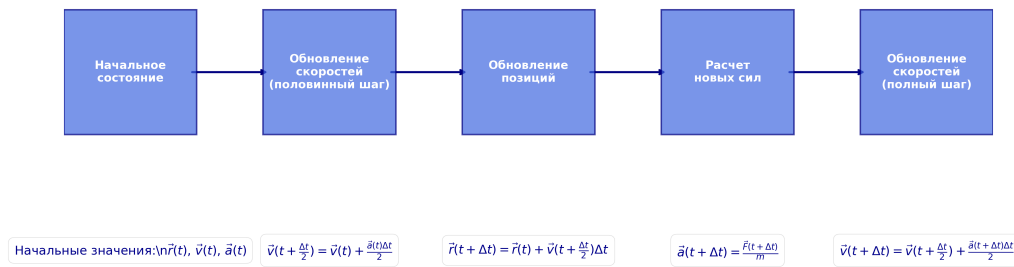


Рис. 4.3: Алгоритм Верле в скоростной форме

4.3 Потенциал Леннард-Джонса

Для моделирования взаимодействия между частицами используется потенциал Леннард-Джонса:

$$U_{LJ}(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{b}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{b}{r} \right)^6 \right]$$

где ε - глубина потенциальной ямы, b - равновесное расстояние между частицами, r - расстояние между частицами.

Сила взаимодействия вычисляется как отрицательный градиент потенциала:

$$\vec{F}_{LJ}(r) = -\nabla U_{LJ}(r) = 12\epsilon \left[\left(\frac{b}{r}\right)^{12} - \left(\frac{b}{r}\right)^6 \right] \frac{\vec{r}}{r^2}$$

На рис. 4.4 представлены графики потенциала и силы Леннарда-Джонса в зависимости от расстояния между частицами.

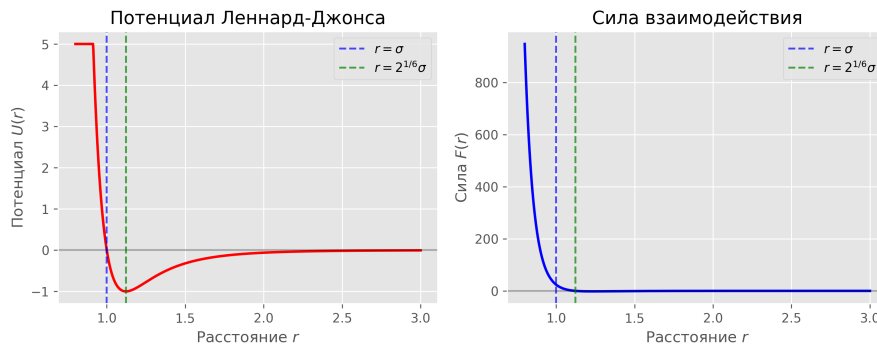


Рис. 4.4: Потенциал и сила Леннарда-Джонса

4.4 Модуль термодинамики

Модуль `thermodynamics.py` реализует функции для расчета различных термодинамических характеристик системы:

1. Расчет температуры системы на основе кинетической энергии:

$$T = \frac{2K}{(2N - 3)k_B}$$

где K - кинетическая энергия, N - число частиц, k_B - постоянная Больцмана.

2. Вычисление флуктуаций длины связи (критерий Линдемана):

$$\delta = \sqrt{\frac{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2}{\langle r \rangle}}$$

3. Расчет парной корреляционной функции, характеризующей структуру системы.

4. Вычисление теплоемкости как производной энергии по температуре:

$$C_V = \frac{dE}{dT}$$

4.5 Модуль анализа фазовых переходов

Модуль `phase_analyzer.py` отвечает за обнаружение и анализ фазовых переходов. Температура плавления определяется по пику теплоемкости и скачку флуктуаций длины связи (рис. 4.5).

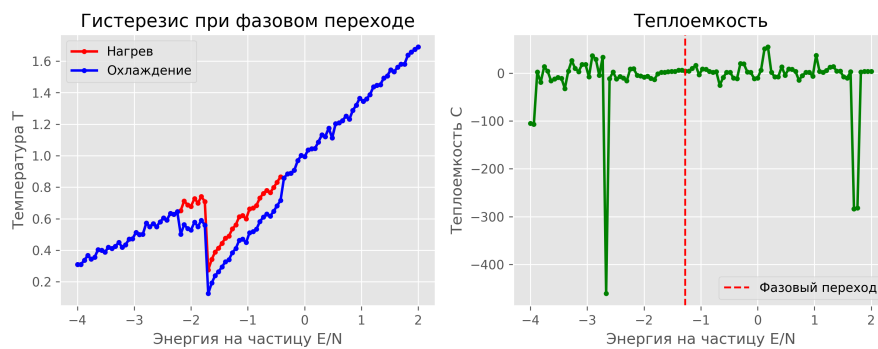


Рис. 4.5: Фазовый переход и теплоемкость

Также реализованы алгоритмы для анализа гистерезиса между нагревом и охлаждением и детектирования оболочечного плавления, характерного для малых кластеров.

5 Процесс моделирования

Моделирование плавления и затвердевания кластеров выполняется в несколько этапов:

1. Инициализация системы:

- Создание кластера с заданным числом частиц
- Установка начальных скоростей, соответствующих низкой температуре

2. Уравновешивание, нагрев и охлаждение системы:

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

3. Анализ результатов:

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

В процессе моделирования использовались следующие параметры:

• Параметры алгоритма:

- Шаги уравновешивания: 100
- Шаги нагрева/охлаждения: 500
- Шаг по времени (dt): 0.0005

- Коэффициент нагрева: 1.002
- Коэффициент охлаждения: 0.998

• **Параметры потенциала:**

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

5.1 Стадии плавления кластера

В процессе моделирования были выявлены следующие стадии плавления кластера из 19 частиц (рис. 5.1):

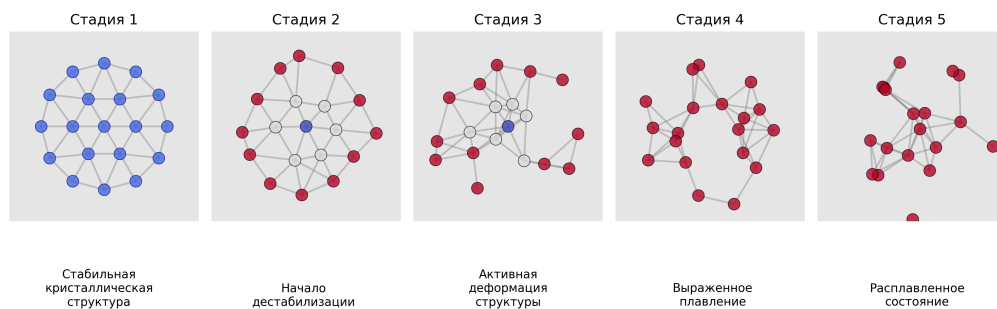


Рис. 5.1: Стадии плавления кластера из 19 частиц

1. Стадия 1: Стабильная кристаллическая структура

Кластер сохраняет идеальную гексагональную структуру с четко различимыми оболочками.

2. Стадия 2: Начало дестабилизации

Появляются первые признаки нарушения идеальной структуры. Частицы во внутренней оболочке начинают совершать более значительные колебания.

3. Стадия 3: Активная деформация структуры

Происходит более выраженное нарушение правильной структуры. Частицы

внутренней оболочки смещаются к центру.

4. Стадия 4: Выраженное плавление

Структура кластера существенно нарушена. В центральной области образуется компактное ядро из сблизившихся частиц.

5. Стадия 5: Расплавленное состояние

Кластер полностью расплавлен, его структура кардинально отличается от начальной конфигурации. Частицы распределены неравномерно.

6 Выводы

1. Разработан программный комплекс для моделирования термодинамических свойств и фазовых переходов в малых кластерах.
2. Выявлены особенности фазовых переходов в наносистемах:
 - Зависимость температуры плавления от размера кластера
 - Наличие гистерезиса между нагревом и охлаждением
 - Явление оболочечного плавления
3. Модульная архитектура программного комплекса обеспечивает гибкость в использовании и возможность расширения функциональности.
4. Определены перспективы развития программного комплекса:
 - Трехмерное моделирование
 - Другие потенциалы взаимодействия
 - Интеграция методов квантовой химии
 - Параллелизация вычислений

Список литературы