

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ (НАЦИОНАЛЬНЫЙ  
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

**Моделирование процесса роста кристаллических структур в  
зависимости от исходных параметров системы.**

crys\_prob:  
Деревянченко Михаил  
Герасимов Илья

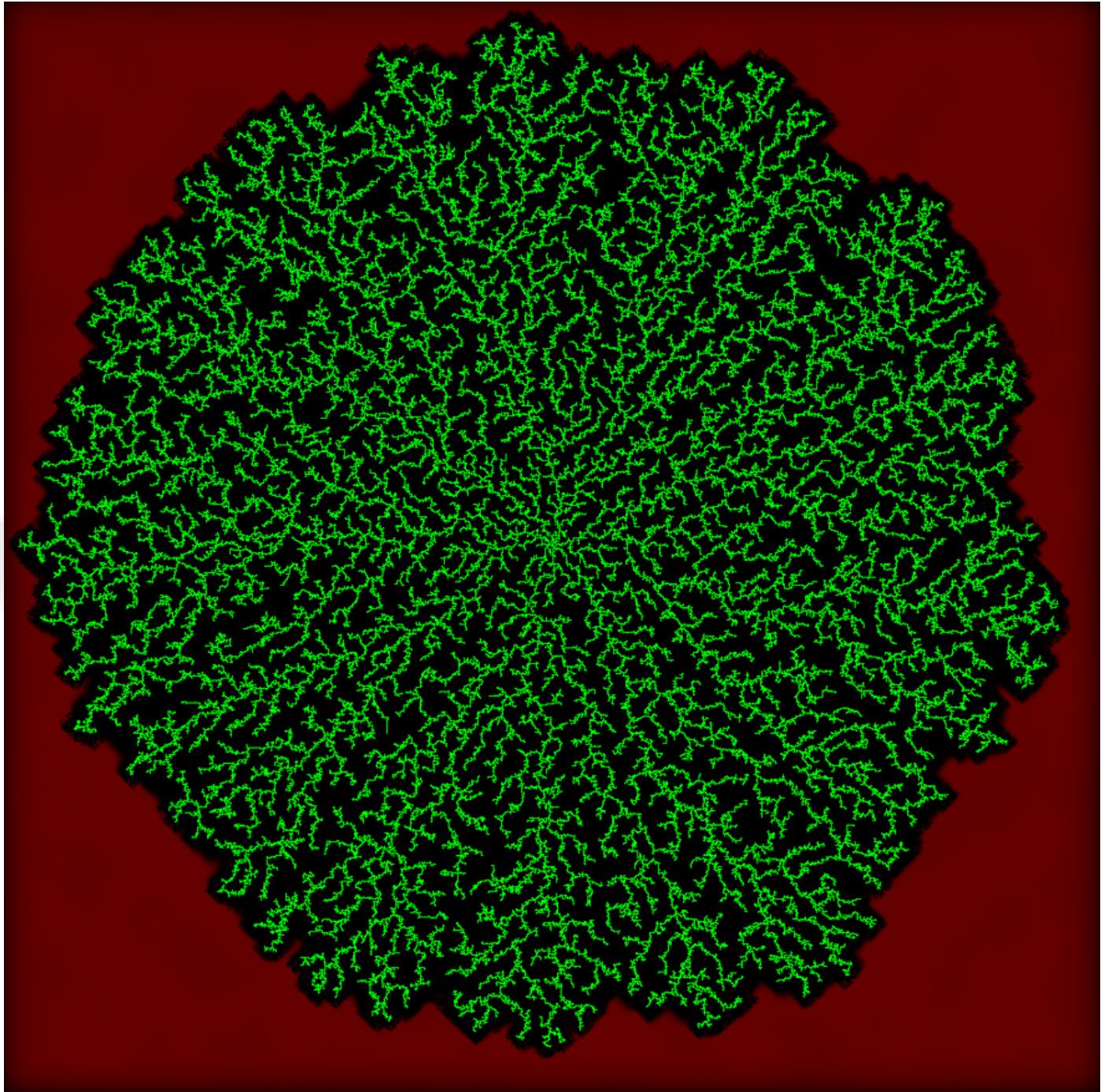
г. Долгопрудный, 2022

# Содержание

- Аннотация
- Теоретические сведения
- Кристаллизация
- Описание модели
- Математическая модель
- Результаты
- Выводы

# Аннотация

В работе представлена модель кристаллизации дендритной структуры, основанная на физических процессах



# Теоретические сведения

Структуры, образующиеся при высыхании биологических жидкостей, перспективное направления исследования в определении болезней и криминалистике. Метод основан на сравнении эталонных и исследуемых структур.

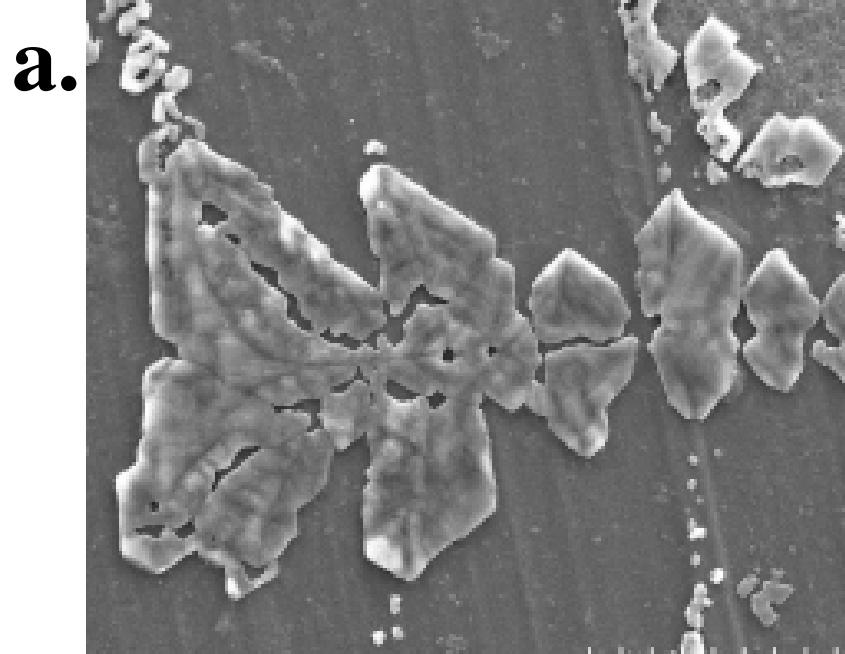


Изображение высохшей слезы под микроскопом

# Кристаллизация

На практике чаще всего в исследуемое вещество добавляют кристаллизующийся раствор и полученную субстанцию искусственно высушивают.

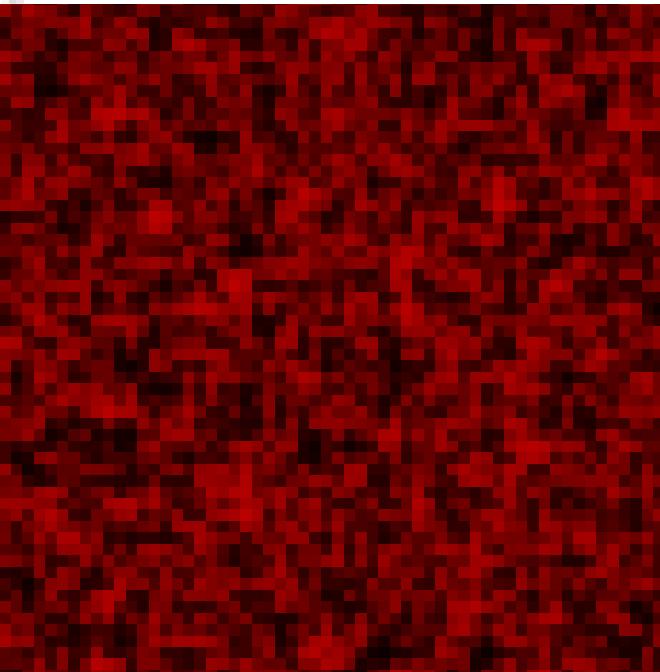
В нашей работе мы рассматривали слезы с добавлением раствора хлорида натрия



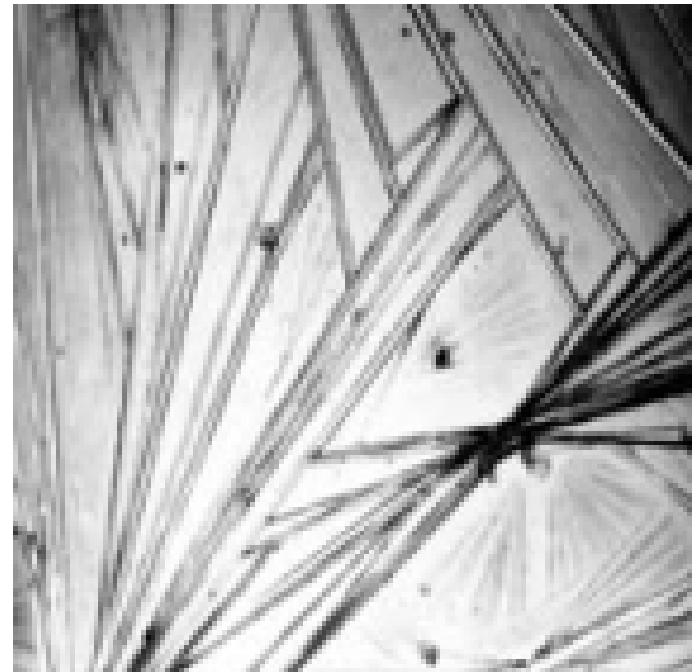
- а. слюна и NaCl,
- б. Моча и CuCl<sub>2</sub>,
- в. глицин с плазмой крови

# Описание модели

В основе модели рассматриваются процессы диффузии и переноса вещества, зависящие от вероятности кристаллизации и растворения. Рассматривается кристаллизация в виде дендритов, так как это наиболее похожая модель на реальную. Все поле разбито на элементарные объемы - ячейки. У каждой ячейки есть кристаллизующееся вещество и примесь. Для каждой ячейки рассчитывается скорость кристаллизации и ее вероятность



Разбиение  
на ячейки



Действительная  
кристаллография



# Математическая модель

Процесс диффузии описывается следующим уравнением:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right)$$

C - концентрация,  
D-коэффициент диффузии

Для решения выбрана разностная схема:

$$C_{ij}^{k+1} = C_{ij}^k + \\ + D \frac{h_t}{h_x^2} (C_{i+1,j}^k + C_{i-1,j}^k - 4C_{ij}^k + C_{i,j+1}^k + C_{i,j-1}^k)$$

$$C_{ij}^0 = \varphi_{ij}, \Delta C_{ij}^k = 0, (i, j) \in \Gamma.$$

Схема устойчива  
при следующем условии:

$$\frac{h_t}{h_x^2} \leq \frac{1}{4D}$$

, где в числителе шаг по времени,  
а в знаменателе расстояние  
между элементарными объемами

Вероятности кристаллизации и растворения элементарного объема соответственно равны:

$$p = 1 - \exp\left(-V \frac{\Delta t}{\Delta x}\right), \quad q = 1 - \exp\left(-W \frac{\Delta t}{\Delta x}\right)$$

, где у экспоненты в числителе тот же шаг по времени, что и в разностной схеме, а в знаменателе расстояние между элементарными объемами

$V$  - скорость роста грани кристалла

$W$  - скорость растворения грани кристалла

Существует точка равновесной концентрации  $C_0$  в которой кристалл, в среднем, растет с такой же скоростью  $V_0$  с которой растворяется. Тогда скорость роста и растворения соответственно:

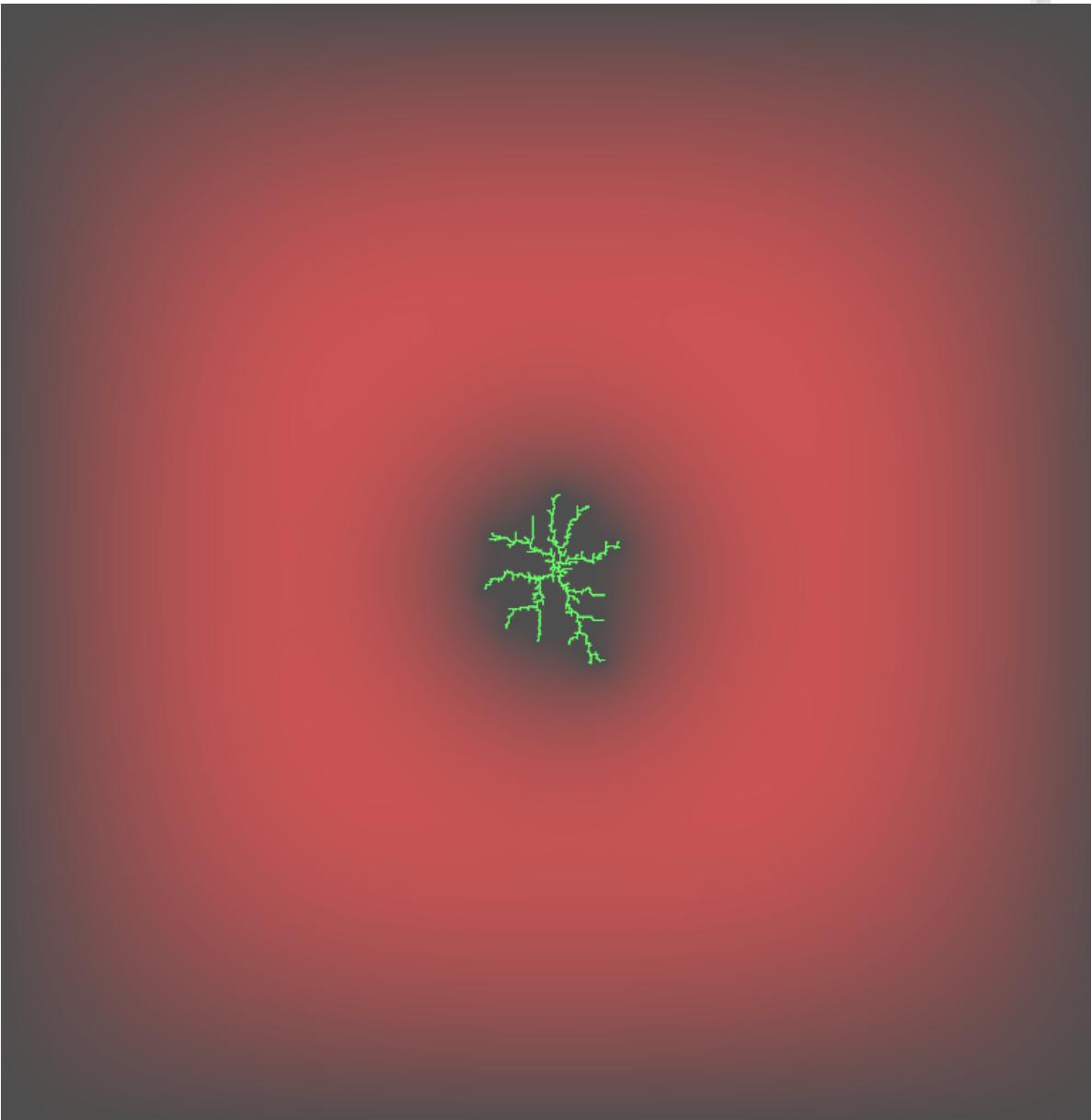
$$V = V_0 \frac{C_0 \left( \rho_a - C_0 \right)}{C_0 \left( \rho_a - C_a \right)}, \quad W = V_0 \frac{C_0 \left( \rho_a - C_a \right)}{\rho_a \left( \rho_a - C_0 \right)}.$$

Пусть кристаллизуется ячейка с концентрацией вещества С. После кристаллизации ее концентрация  $C'$  должна стать равной плотности вещества кристалла  $\rho$ . То есть в эту ячейку должно дополнительно поступить вещество в количестве  $C_h = \rho - C$  из соседних ячеек. Соседние ячейки рассматриваются только группами. В группу относятся все ячейки из раствора, находящиеся на одинаковом расстоянии от кристаллизующейся ячейки. Обозначим через  $S_i$  суммарное количество вещества, находящееся во всех ячейках  $i$ -й группы. Сначала необходимое вещество берется из первых соседей. Если во всех первых соседях не набирается необходимое количество вещества, то рассматриваются вторые, третьи (и так далее) соседи. Пусть выполняются условия  $S_1 + S_2 + \dots + S_i < C_h$  и  $S_1 + S_2 + \dots + S_{i+1} \geq C_h$ . Тогда из ячеек 1-х, 2-х, ...,  $i$  х соседей забирается все вещество, то есть концентрация в них полагается равной нулю. И из последнего слоя соседей забирается недостающее вещество в количестве  $\sim C = C_h - S_1 + S_2 + \dots + S_i$ . Из каждой ячейки  $(i+1)$ -о слоя соседей количество забираемого вещества пропорционально ее изначальной концентрации:

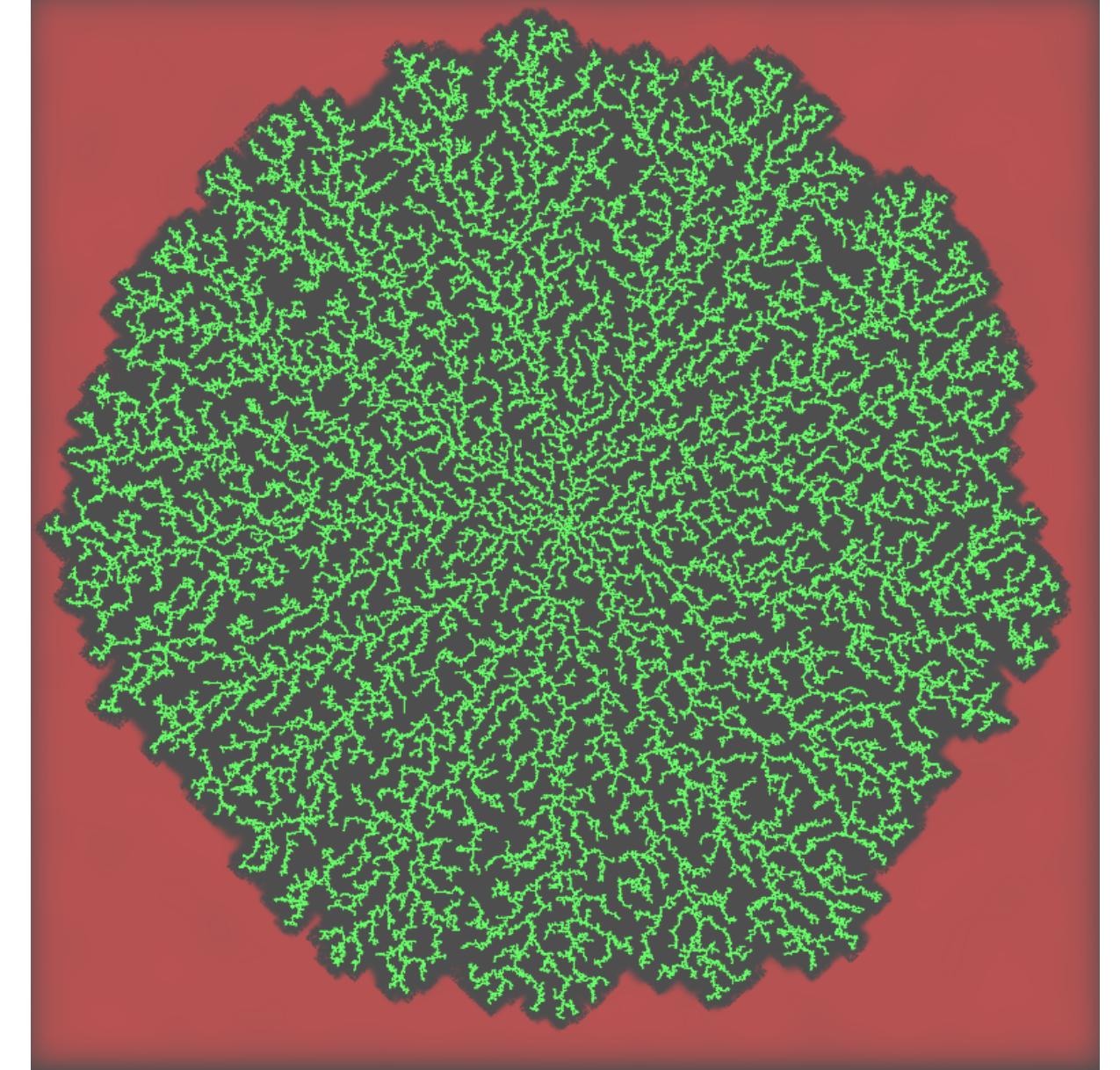
$$C'_j = C_j \frac{\tilde{C}}{C_1 + \dots + C_K}, \quad j = \overline{1, K},$$

При растворение ничего не происходит

# Результаты

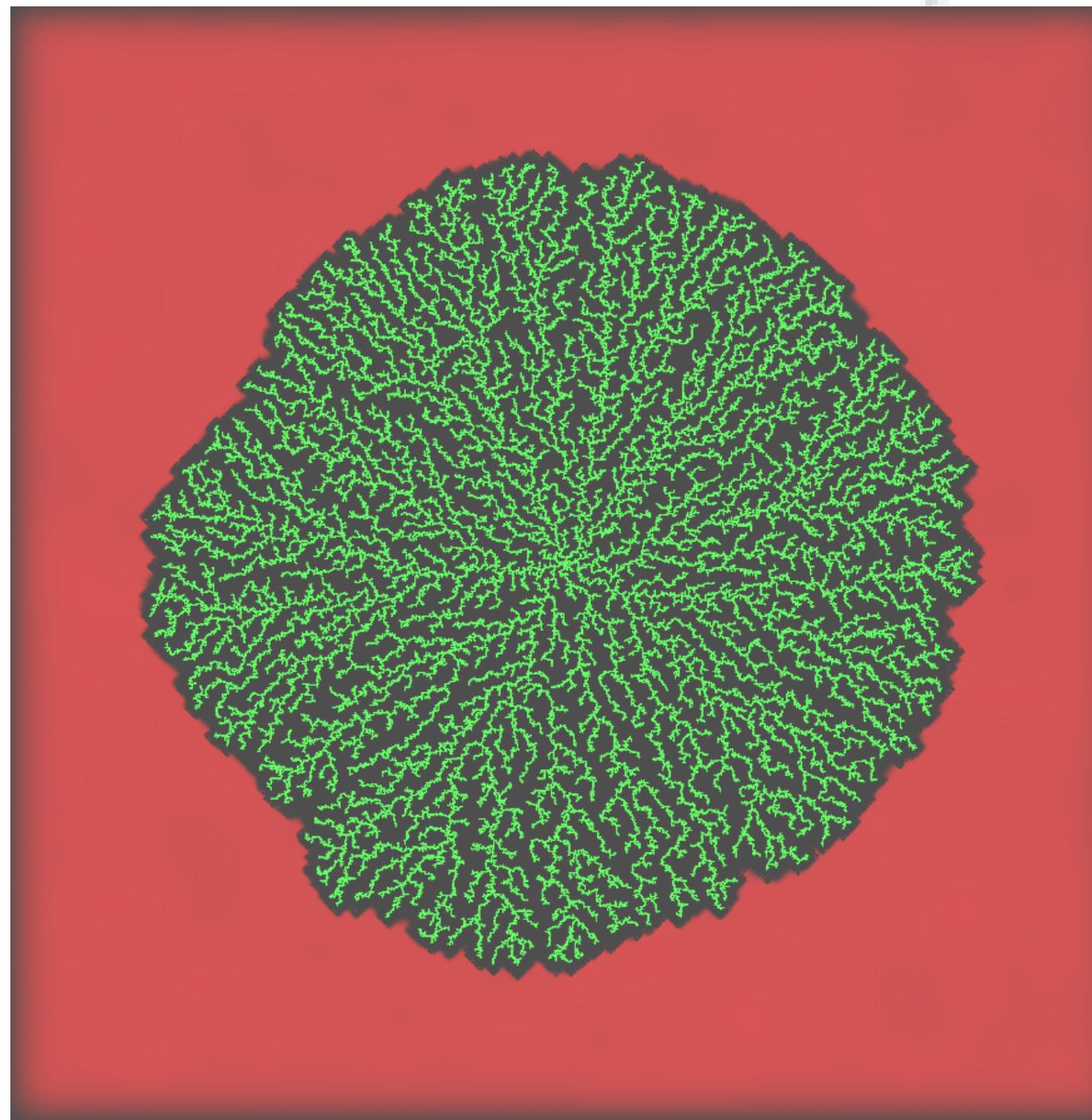


Реальные условия.  
1.5с работы



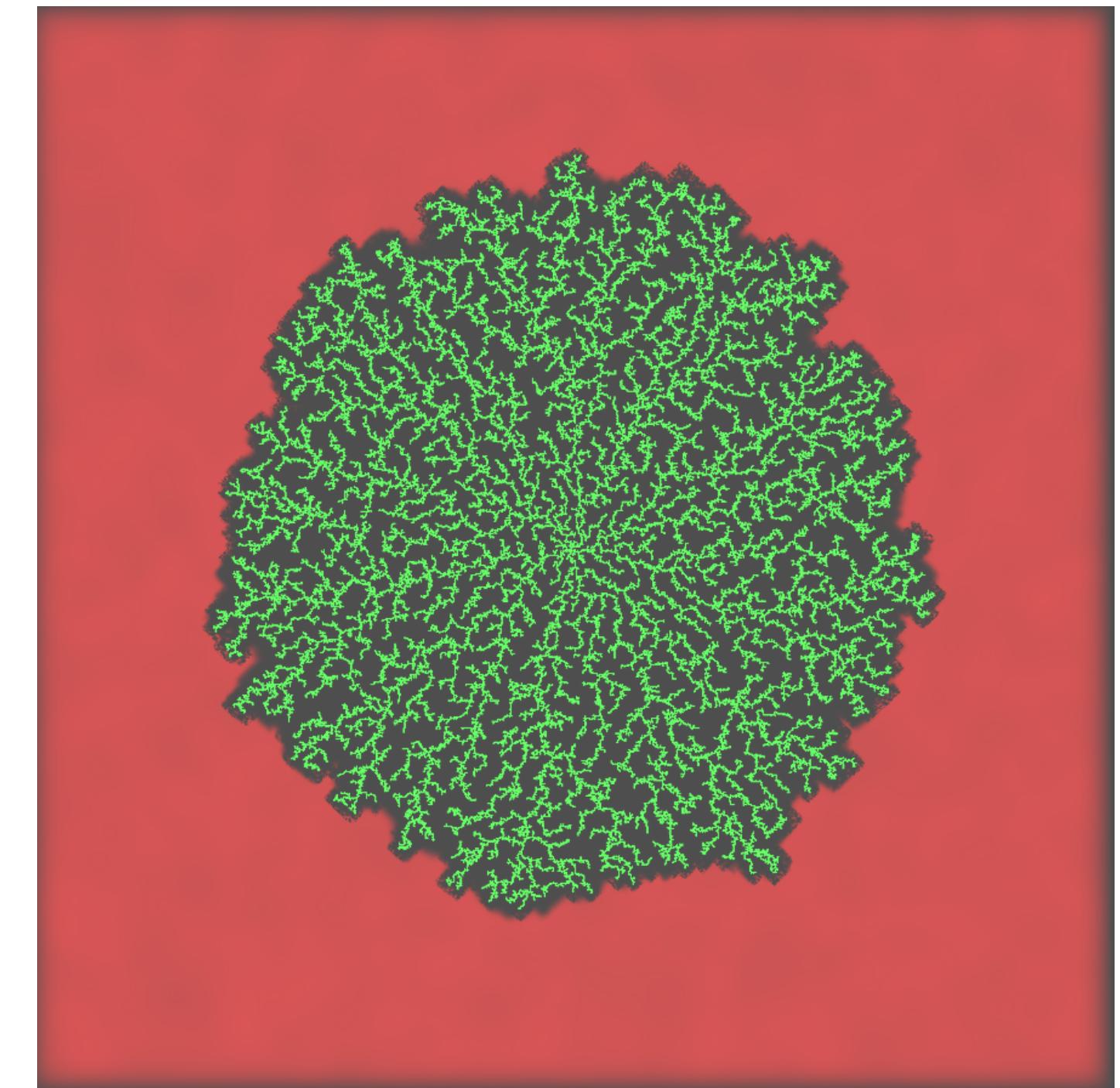
Условно взятые  
стандартные условия

# Изменение равновесной концентрации



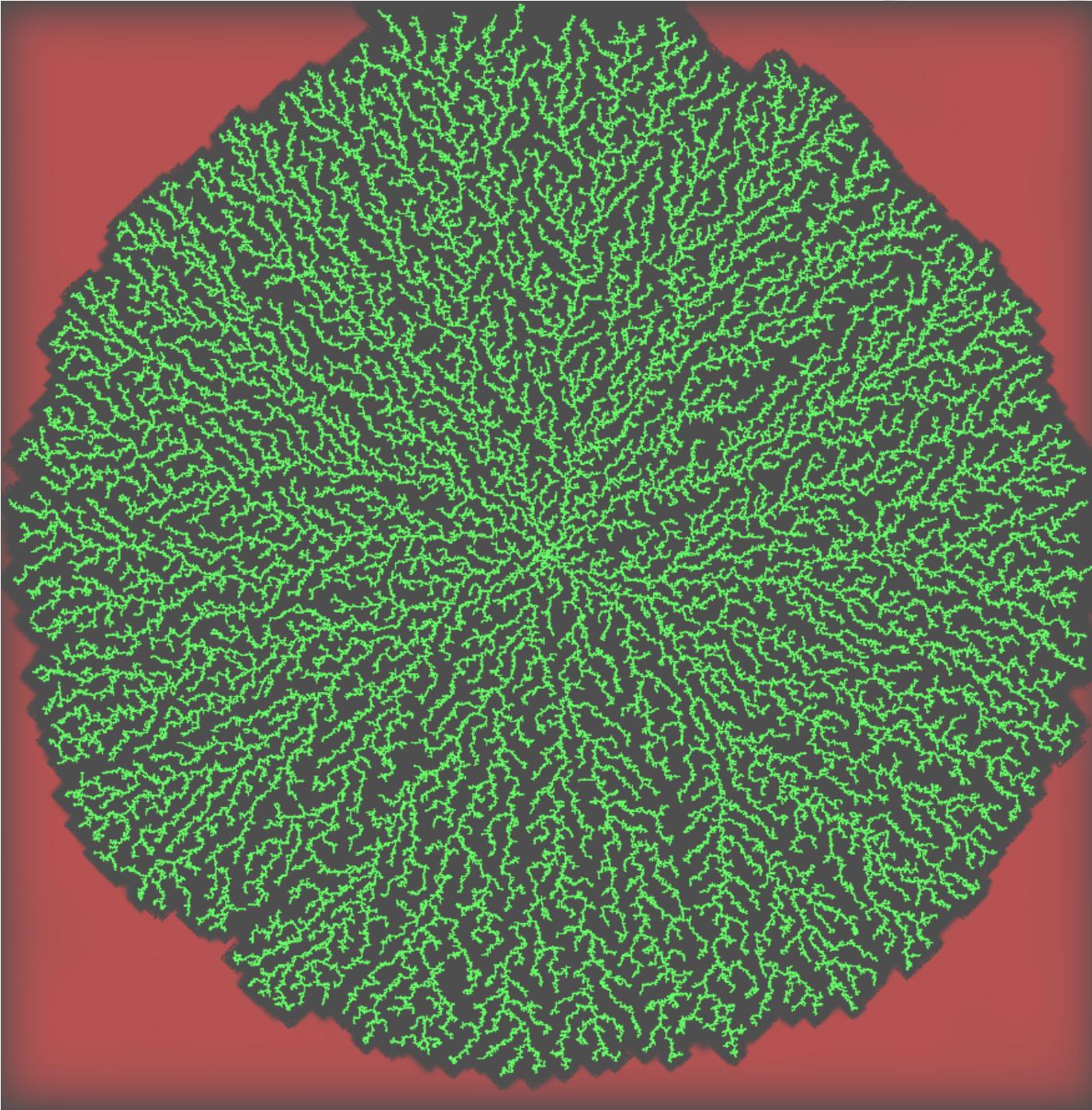
ниже стандартной 0.2s

( $A_s = A/S$  отношение введенного значения и стандартного)

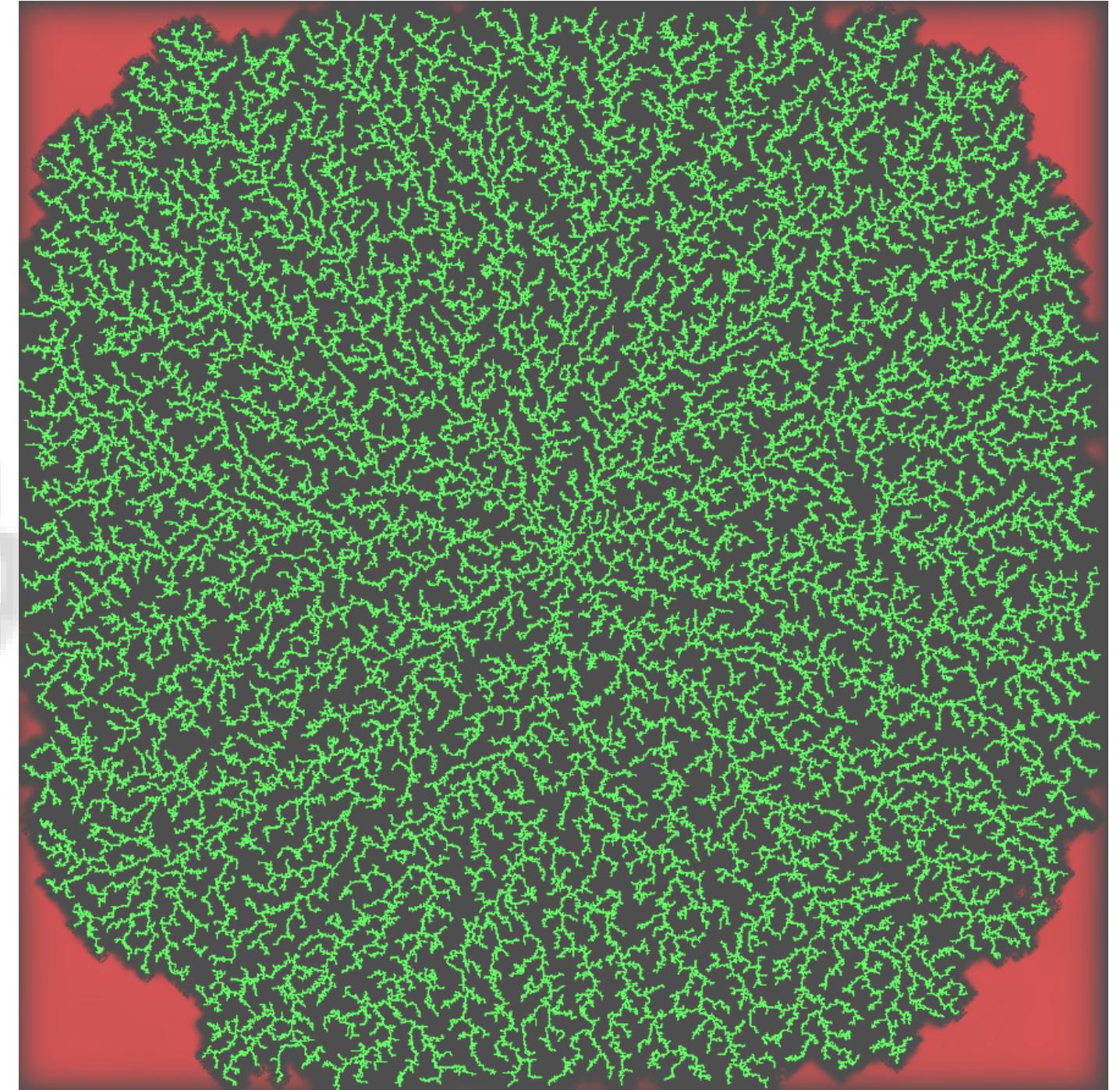


выше стандартной 1.8s

# Изменение равновесной скорости

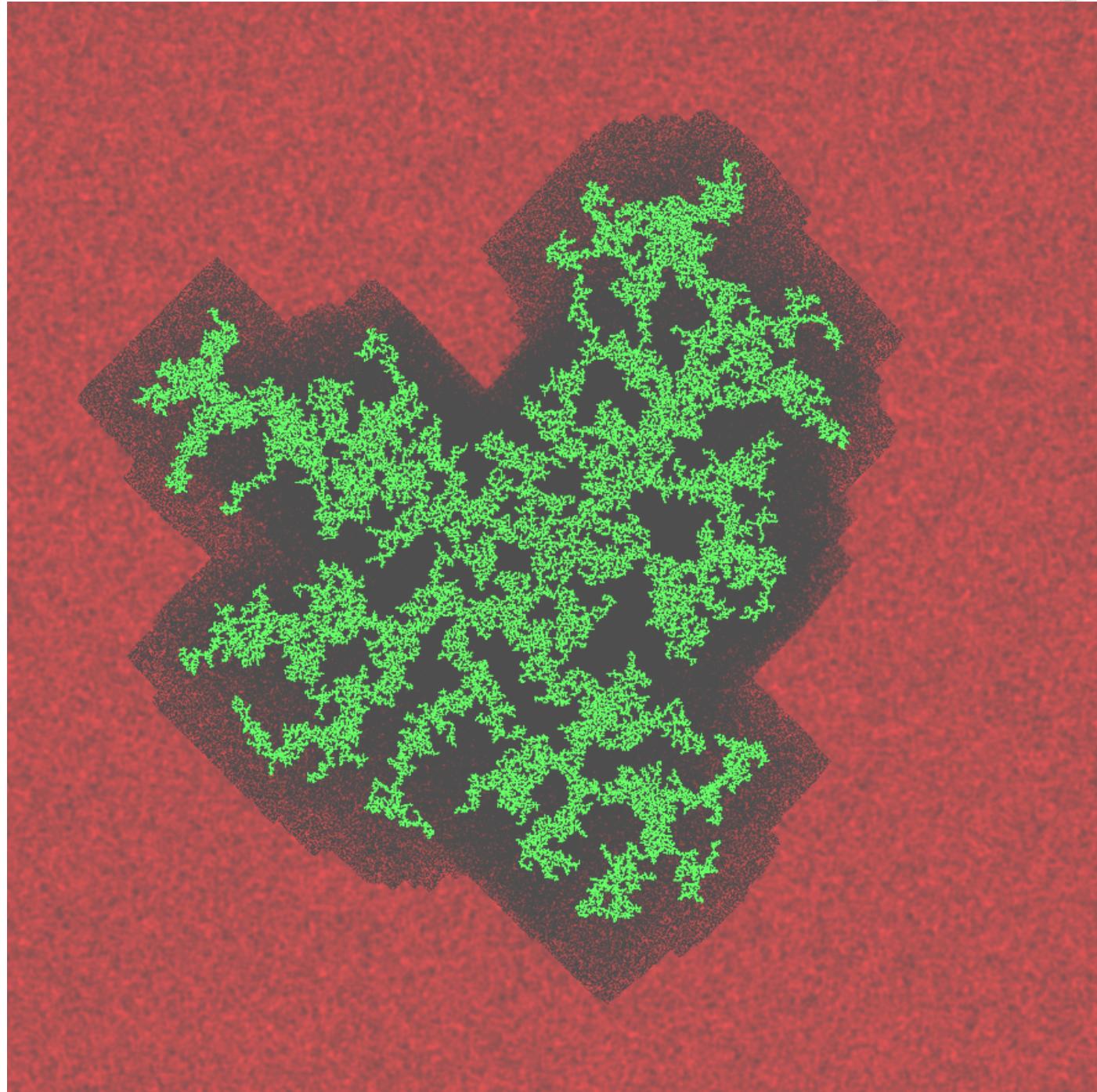


ниже стандартной 0.1s

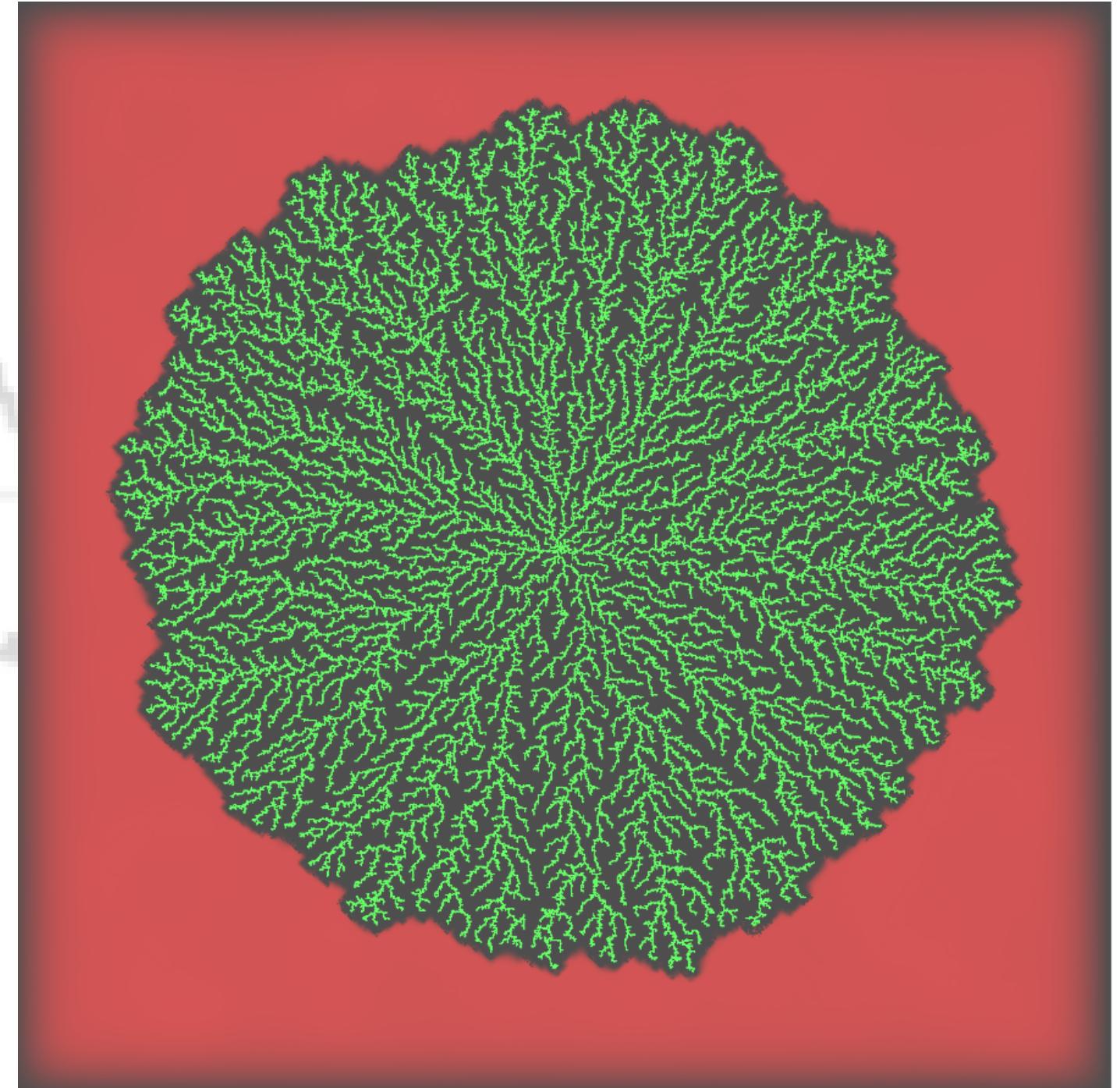


выше стандартной 5s

# Изменение коэффициента диффузии

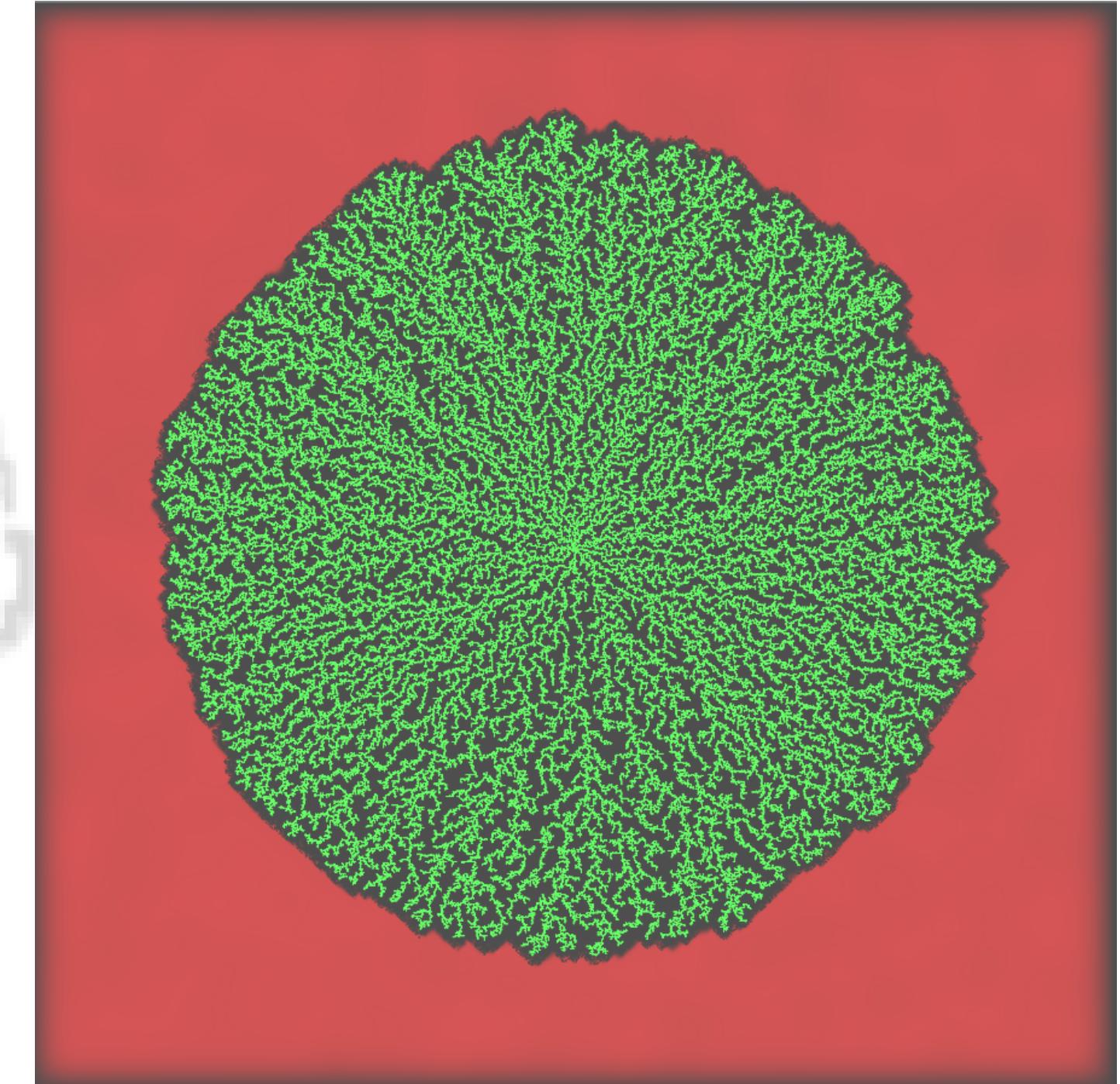
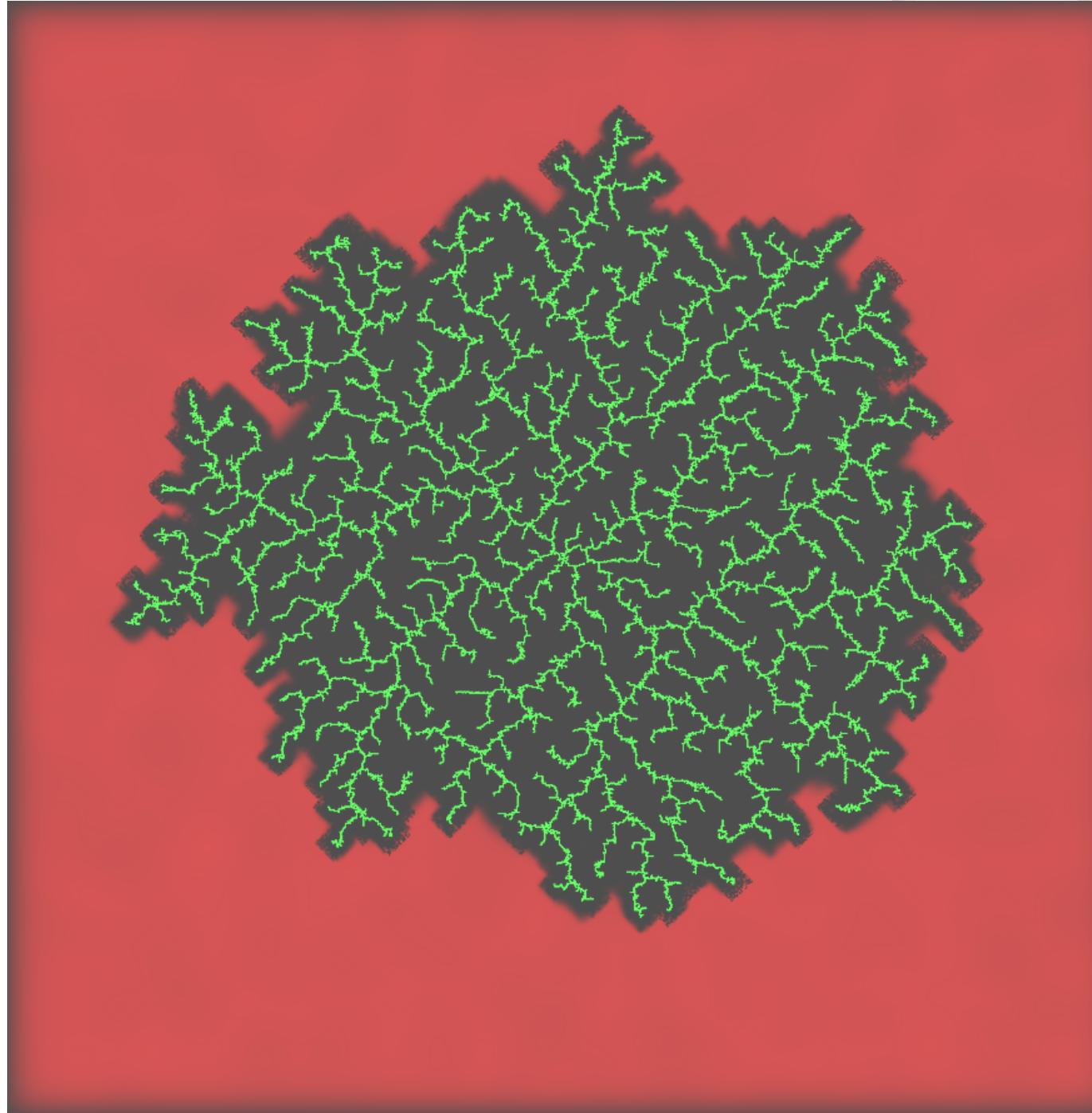


ниже стандартного 0.01s



выше стандартного 2.5s

# Изменение начальной концентрации



# Выводы

- Была получена модель кристаллизации дендритных структур
- Были получены результаты, при различных начальных условиях
- Полученные зависимости совпадают с теоретическими
- Было бы интересно провести данный эксперимент при больших масштабах и мощностях
- По градиенту в модели видно, что диффузия происходит верно. Но из-за выбранных граничных условий и приближенному решению диффура вещество как бы стекается к центру, а его общее количество уменьшается

# Ссылки и литература

- Баранов, В.Г. Моделирование процесса роста дендритных кристаллических структур / В.Г. Баранов, А.Г. Храмов // Компьютерная оптика. – 2001. – № 21. – С. 193-197.
- Малов, А.Н. Визуализация структур биологических жидкостей пленочно-кристаллографическим методом / А.Н. Малов, Е.С. Мусатова // Физика: Фундаментальные и прикладные исследования, образование. – 2014. – С. 106-109.
- Тарасевич, Ю.Ю. Диагностический метод клиновидной дегидратации биологических жидкостей с точки зрения физики / Ю.Ю. Тарасевич, И.В. Водолазская, О.П. Исакова // Клинико-лабораторный консилиум. – 2011. – № 2. – С. 60-62
- Еремеенкова, О. О. Исследование слезной жидкости человека методом биокристаллографии при воздействии низкоинтенсивного лазерного излучения : магистерская диссертация по направлению подготовки: 03.04.02 - Физика. - Барнаул, 2019.

# Спасибо за внимание

