

# Домашнее задание 1

Задание:

1. Определить температуру плавления металла Z-методом.
2. Определить величины разницы плотностей кристалла и жидкости  $\Delta\rho$  и теплоты плавления  $\Delta H$ .

## Введение

Метод Z, также известный как "метод нулевого давления" представляет собой вычислительный метод в молекулярной динамике для определения температуры плавления металла путем моделирования поведения кристаллической структуры металла при различных температурах и нулевом давлении. Этот метод основан на том, что при температуре плавления структура металла начинает переходить из упорядоченной кристаллической фазы в неупорядоченную аморфную фазу. Температура плавления определяется путем анализа изменений в структуре металла и кинетических параметров в зависимости от температуры, при которой наблюдается фазовый переход.

## Задание 1

Запускаем LAMMPS с грубым шагом по температуре:

```
lmp -in in.modzmethod -v lattice_type bcc -v a0 3.3079 -v T_init 3300 -v T_step 100 -v num_steps 16 -v element_name Nb -v atomic_mass 92.9 -v potential_type "eam/alloyv potential_file "Nb.eam.alloy"
```

В результате получаем набор траекторий с начальными температурами от 3300 К до 4900 К. Снимки финальных конфигураций для нескольких показаны на рисунке 1 последних траекторий (получены в OVITO анализом файлов .data):

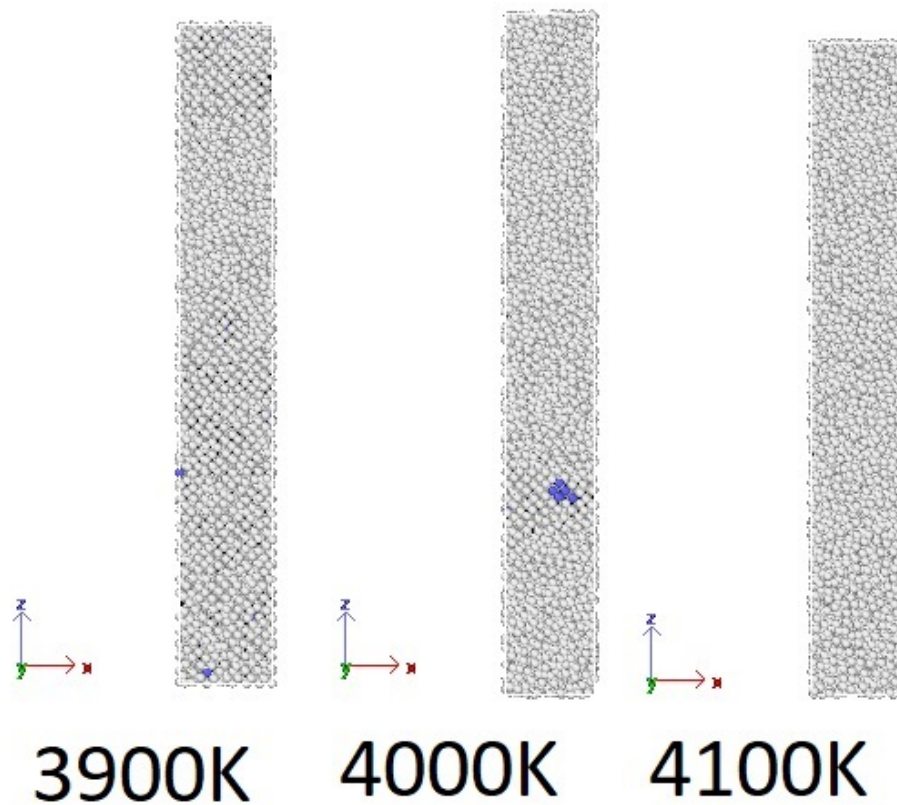


Рис. 1: OVITO

По процентному содержанию кристаллов ВСС видно, что плавление происходит между 4000K и 4100K.

Для уточнения проведём серию расчетов с начальными температурами от 4010K до 4090K с шагом 10 К. В этих расчетах для повышения точности увеличим длительность в 65 строке до 45000 шагов.

На рисунке 2 приведено процентное содержание целых кристаллов. Можно увидеть что 0% появляются при температуре 4030 К.

	Structure	Count	Fraction	Id
<input checked="" type="checkbox"/>	Other	4889	99.8%	0
<input checked="" type="checkbox"/>	FCC	0	0.0%	1
<input checked="" type="checkbox"/>	HCP	0	0.0%	2
<input checked="" type="checkbox"/>	BCC	11	0.2%	3

4010K

	Structure	Count	Fraction	Id
<input checked="" type="checkbox"/>	Other	4878	99.6%	0
<input checked="" type="checkbox"/>	FCC	0	0.0%	1
<input checked="" type="checkbox"/>	HCP	0	0.0%	2
<input checked="" type="checkbox"/>	BCC	22	0.4%	3

4020K

	Structure	Count	Fraction	Id
<input checked="" type="checkbox"/>	Other	4900	100.0%	0
<input checked="" type="checkbox"/>	FCC	0	0.0%	1
<input checked="" type="checkbox"/>	HCP	0	0.0%	2
<input checked="" type="checkbox"/>	BCC	0	0.0%	3

4030K

Рис. 2: OVITO - процентное содержание кристаллов

Рассмотрим ход температуры со временем при начальных значениях от 4010 до 4030 К:

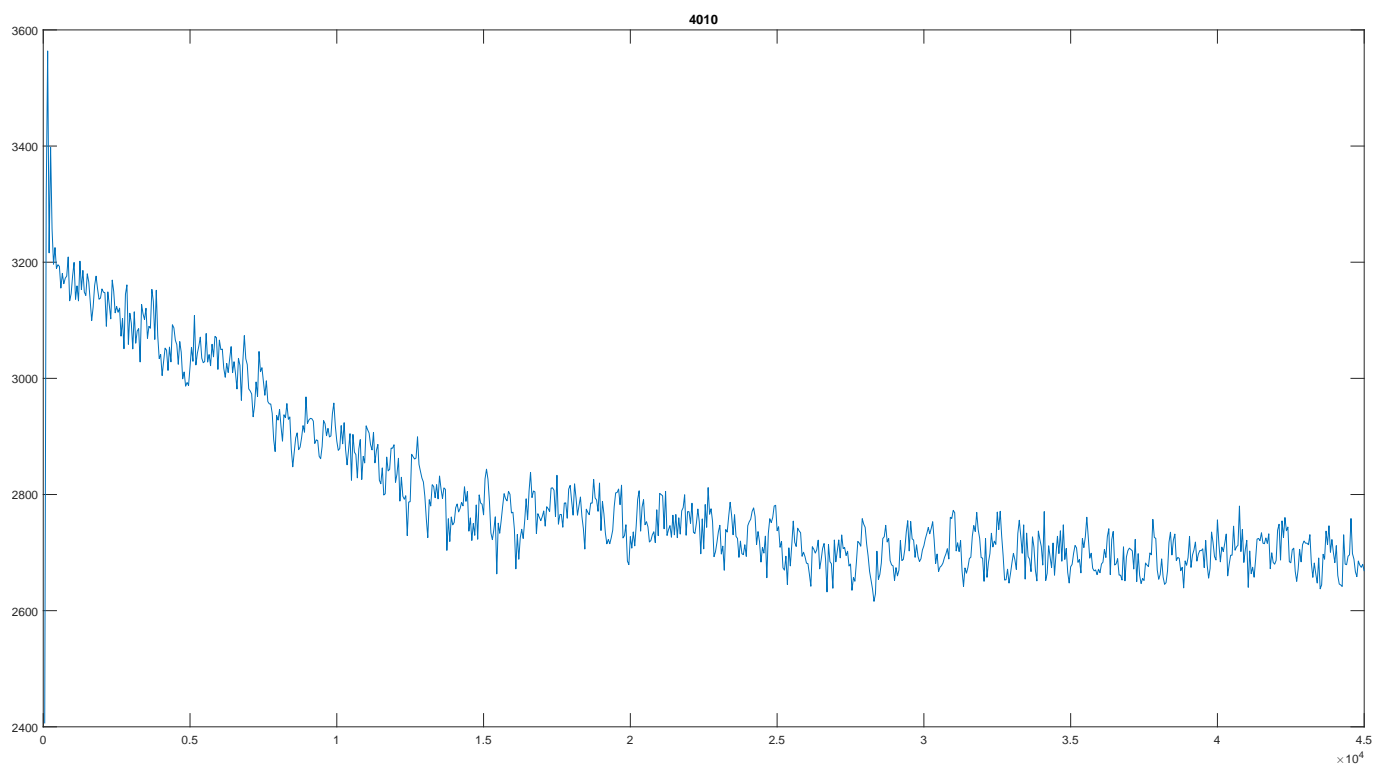


Рис. 3: 4010 К

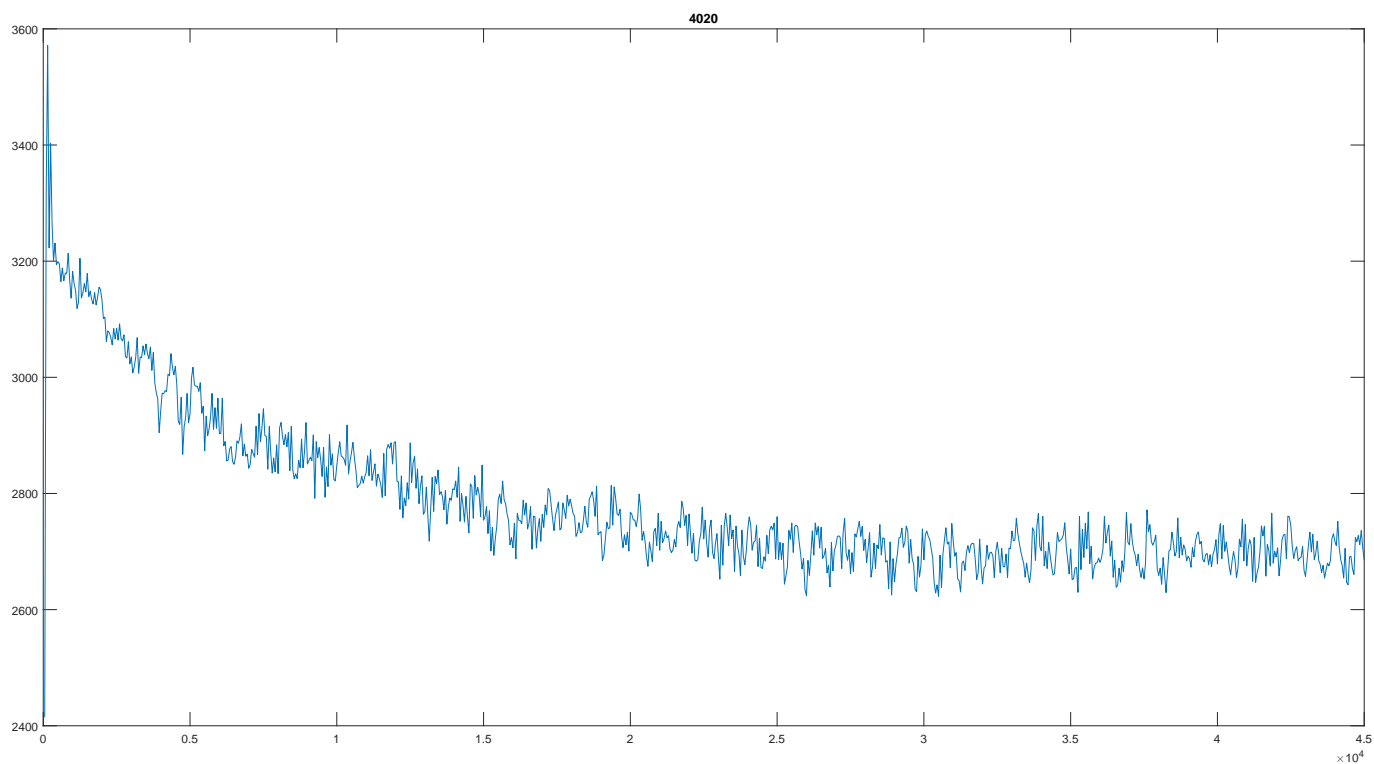


Рис. 4: 4020 К

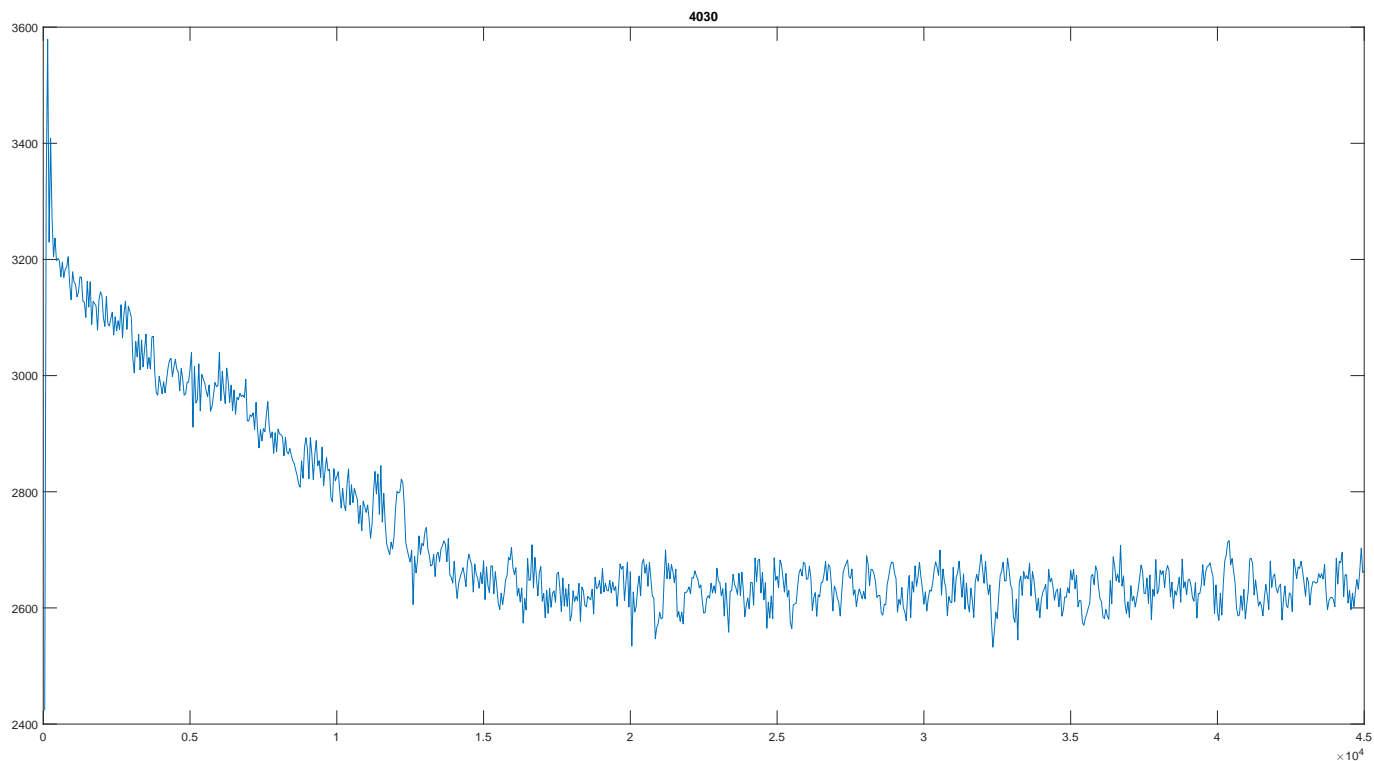


Рис. 5: 4030 K

Видно, что в случае 4030 K система явно выходит к равновесию через 15000 шагов. Усредняя температуру по этому участку, получаем температуру плавления 2634 K (табличная температура плавления 2741,15 K).

Рассмотрим графики зависимости средней температуры системы от задаваемой и от энтальпии (рис. 6-7):

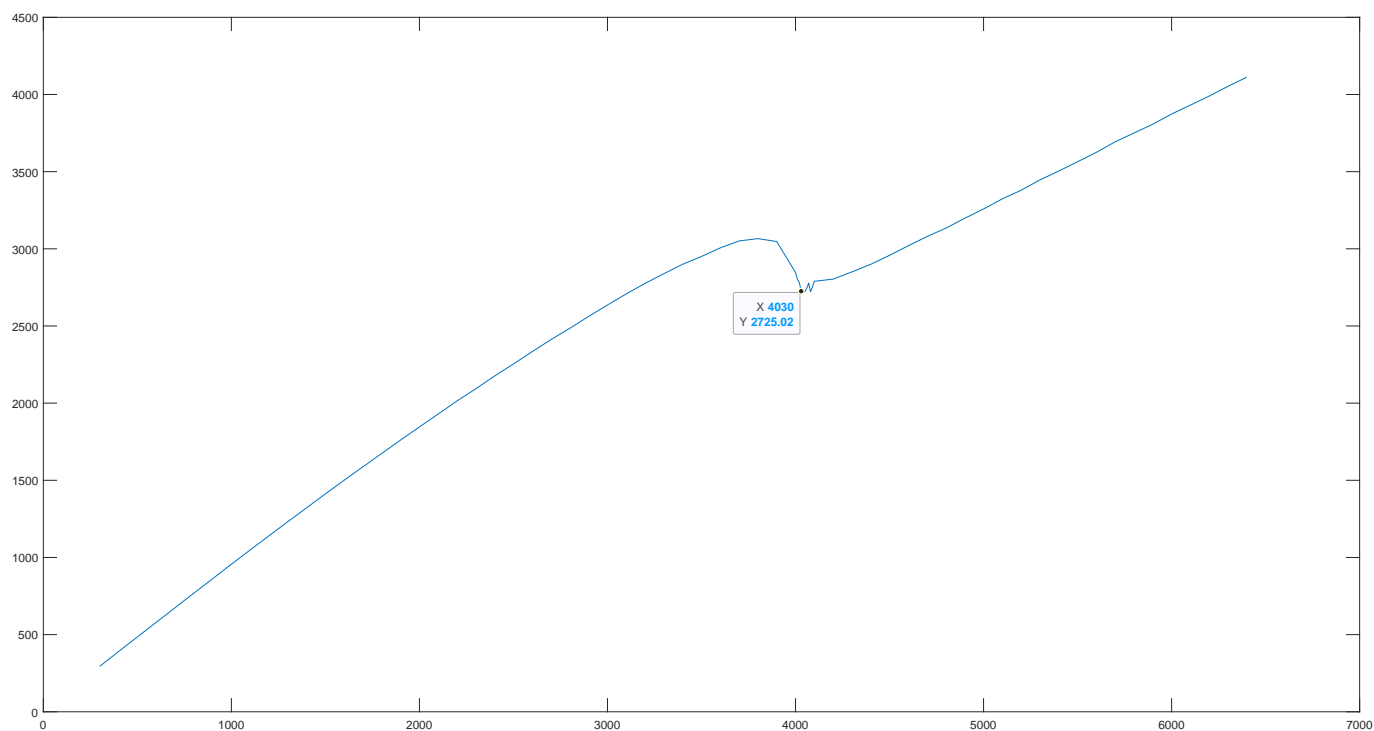


Рис. 6: Зависимость средней температуры системы от задаваемой

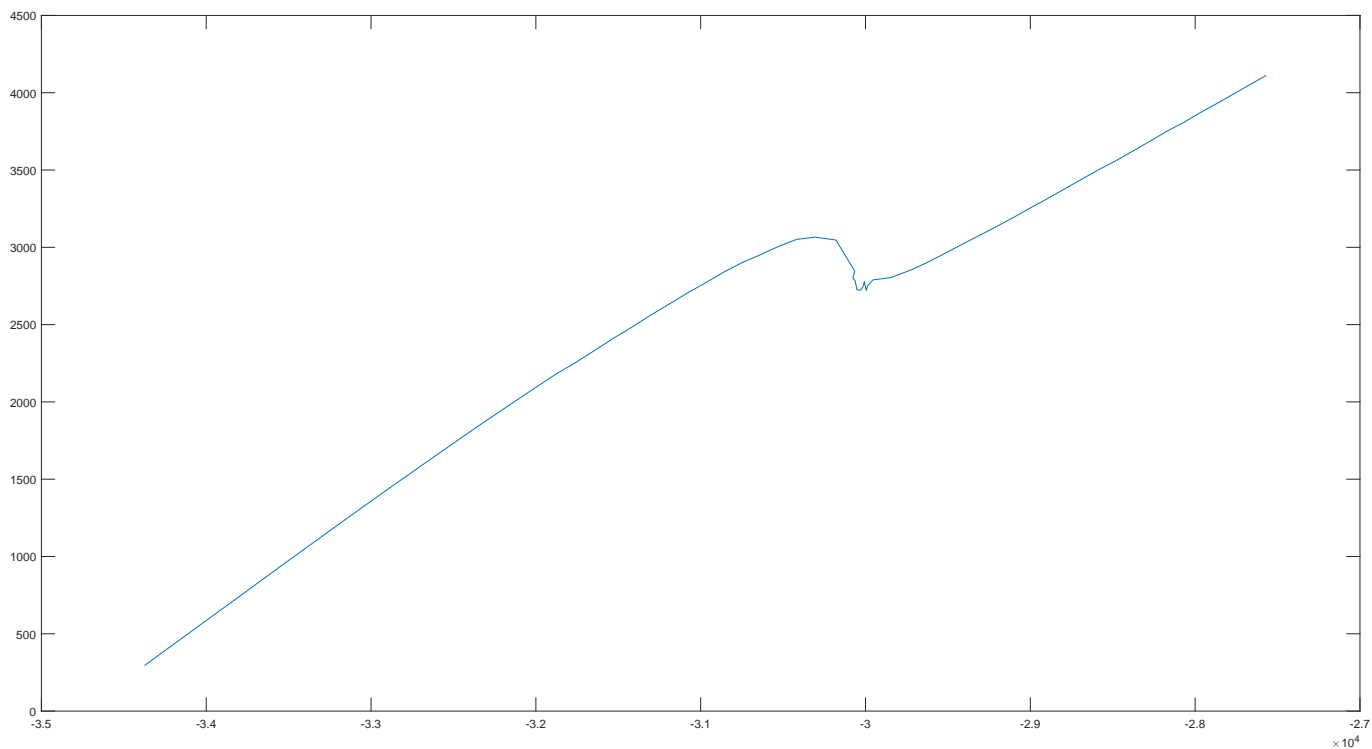


Рис. 7: Зависимость средней температуры системы от энтальпии

Как видно по 1-ому графику (рис. 6) как раз при задаваемых 4080 K получается минимальная средняя температура. А во 2-ом графике (рис. 7) явно наблюдается провал температуры с ростом энергии, ожидаемый в Z-методе.

## Задание 2

Запустим для температуры 2634 К расчеты с однофазным кристаллом и жидкостью:

```
lmp -in in.crystal -v lattice_type bcc -v a0 3.3079 -v T_init 2634 -v  
element_name Nb -v atomic_mass 92.9 -v potential_type "eam/alloyv"  
potential_file "./Nb.eam.alloy"
```

```
lmp -in in.liquid -v lattice_type bcc -v a0 3.3079 -v T_init 2634 -v  
element_name Nb -v atomic_mass 92.9 -v potential_type "eam/alloyv"  
potential_file "./Nb.eam.alloy"
```

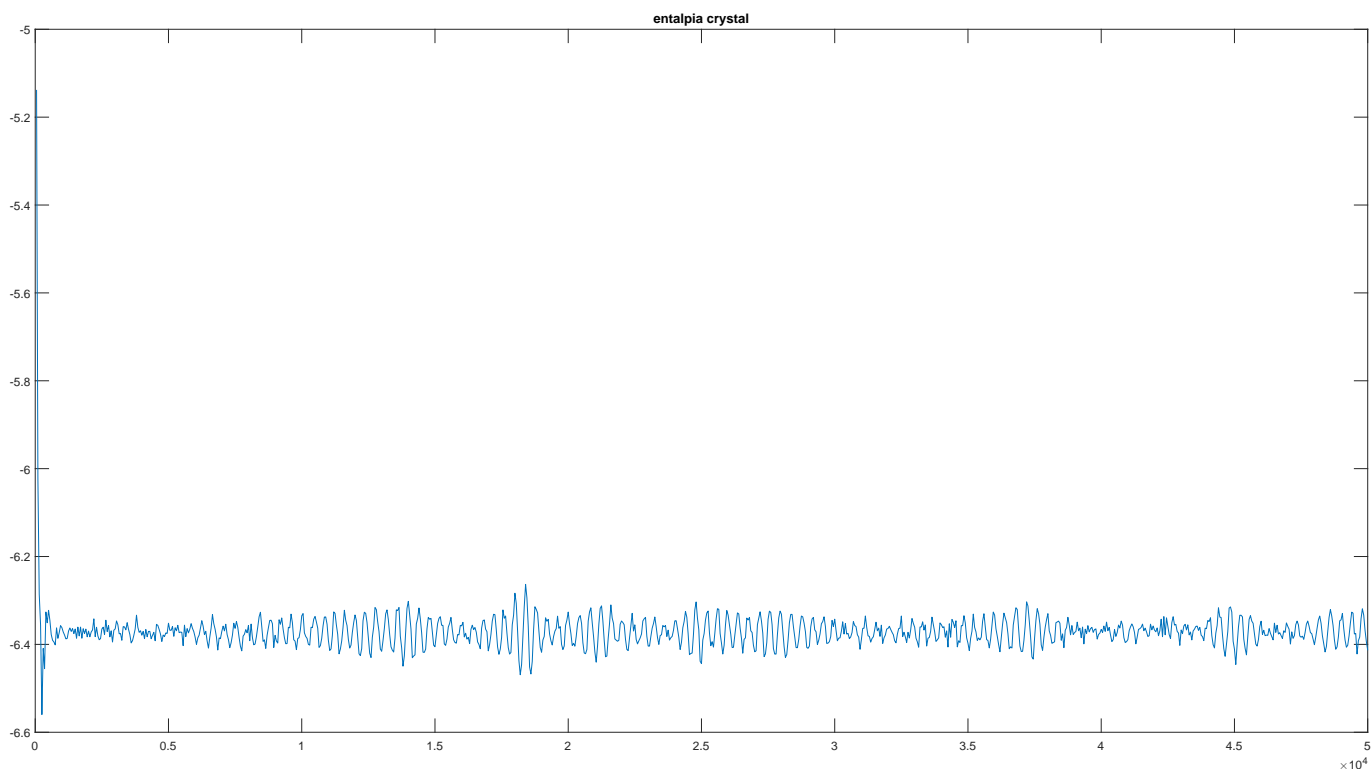


Рис. 8: enthalpia crystal

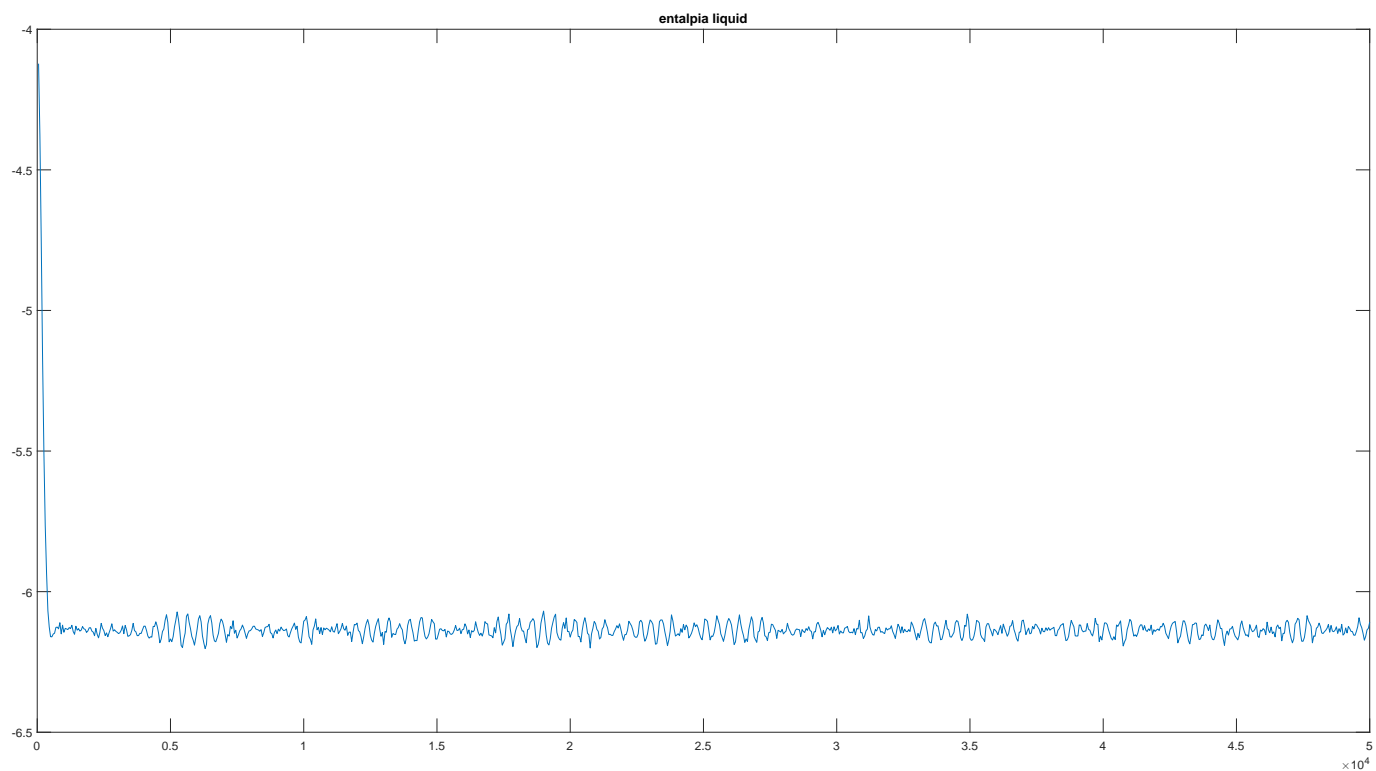


Рис. 9: entalpia liquid

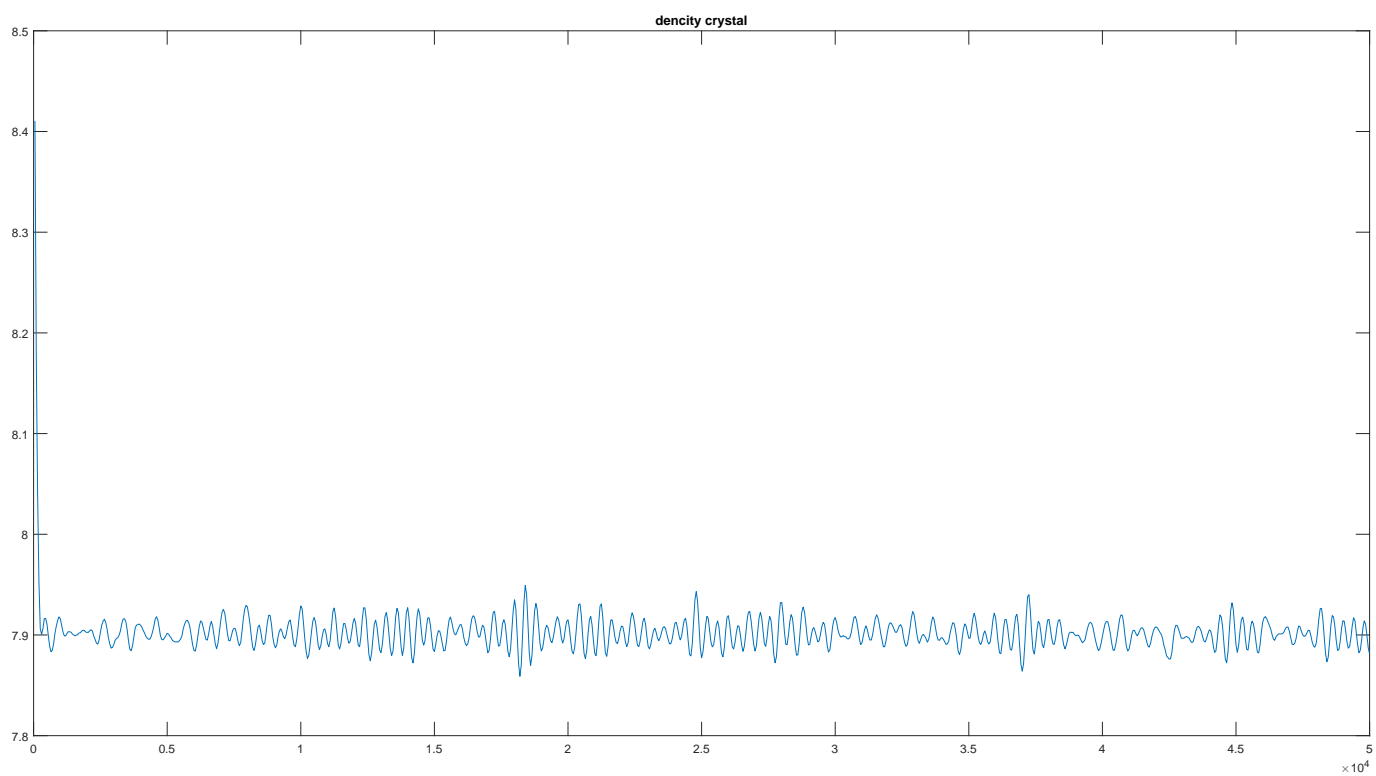


Рис. 10: density crystal

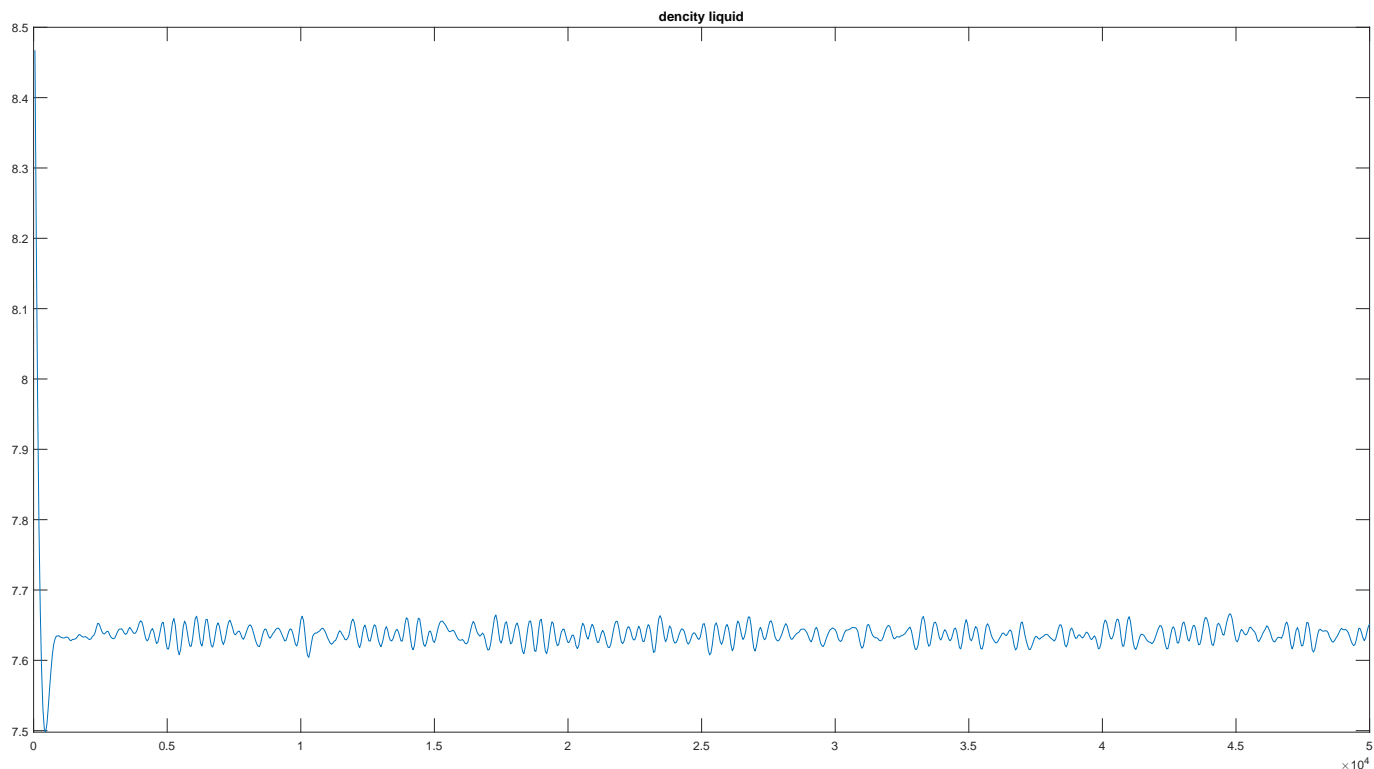


Рис. 11: density liquid

После усреднения получаем плотность кристалла на линии плавления  $7.9026 \text{ г/см}^3$ , плотность жидкости  $7.6378 \text{ г/см}^3$ . Разница плотностей  $0.2649 \text{ г/см}^3$ . Энтальпия кристалла  $-6.3699 \text{ эВ/атом}$ , жидкости  $-6.1304 \text{ эВ/атом}$ . Теплота плавления  $0.2395 \text{ эВ/атом} = 23.1117 \text{ кДж/моль}$  (табличное значение  $26.4 \text{ кДж/моль}$ ).

Погрешность температуры плавления  $188.4622 \text{ К}$ , а по факту вычисленное значение температуры плавления Ниобия  $2634 \text{ К}$  отличается от табличного ( $2741.15 \text{ К}$ ) на  $106.85 \text{ К}$