

Исследование плавления и затвердевания малых кластеров

Отчет по 2 этапу проекта

Лихтенштейн А.А., Рогожина Н.А., Шилоносов Д.В., Гэинэ А.

Содержание

1	Цель работы	5
2	Задание	6
3	Алгоритмы, используемые в работе	7
3.0.1	Ключевые особенности:	9
4	Выводы	10
	Список литературы	11

Список иллюстраций

Список таблиц

1 Цель работы

Целью данного этапа является изучение теоретических основ метода молекулярной динамики и построение модели для исследования процессов плавления и затвердевания малых кластеров с “магическими” числами частиц.

2 Задание

1. Изучить теоретические основы метода молекулярной динамики
2. Рассмотреть особенности фазовых переходов в малых кластерах
3. Разработать физическую модель для исследования плавления и затвердевания малых кластеров с “магическими” числами частиц (7, 19, 37)
4. Определить необходимые параметры и алгоритмы для дальнейшего моделирования

3 Алгоритмы, используемые в работе

1. Алгоритм генерации гексагональных кластеров

- **Цель:** Создание начальной конфигурации кластера с “магическими” числами частиц (7, 19, 37).
- **Шаги:**
 1. Центральная частица размещается в начале координат.
 2. Последующие частицы добавляются концентрическими оболочками вокруг центра.
 3. Для каждой оболочки рассчитываются координаты частиц с использованием углов и радиусов, обеспечивающих гексагональную симметрию.
- **Формула:** Координаты частиц в оболочке shell:

$$angle = \frac{2\pi i}{6 \cdot shell}, positions[i] = [shell \cdot b \cdot \cos(angle), shell \cdot b \cdot \sin(angle)]$$

2. Алгоритм Верле (скоростная форма)

- **Цель:** Интегрирование уравнений движения частиц с высокой точностью.
- **Шаги:**
 1. Обновление скоростей на половину шага:

$$\vec{r}_i^{n+1/2} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i^n \cdot \frac{\Delta t}{2}$$

2. Обновление позиций:

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i^{n+1/2} \cdot \Delta t$$

3. Пересчёт ускорений на основе новых позиций.

4. Завершение обновления скоростей:

$$\vec{v}_i^{n+1} = \vec{v}_i^{n+1/2} + \vec{a}_i^{n+1} \cdot \frac{\Delta t}{2}$$

3. Расчёт термодинамических характеристик

- **Температура:**

$$T = \frac{2}{(2N-3)k} \sum_i \frac{m_i(\vec{v}_i - \vec{v}_{cm})^2}{2}$$

где \vec{v}_{cm} — скорость центра масс кластера, k — постоянная Больцмана.

- **Флуктуации длины связи:**

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{N(N-1)} \sum_{i < j} \frac{\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2}{\langle r_{ij} \rangle}}$$

- **Теплоемкость:**

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

4. Анализ фазовых переходов

- **Методы:**

- **Пик теплоемкости:** Определяется через производную энергии по температуре.

- **Критерий Линдемманна:** Плавление фиксируется при превышении порога флуктуаций длины связи (обычно 0.1).

- **Гистерезис:** Сравнение кривых нагрева и охлаждения для выявления различий.

5. Визуализация данных

- **Методы:**

- Построение графиков зависимостей (температура, энергия, теплоемкость).
- Анимация движения частиц с отображением связей.
- Парная корреляционная функция для анализа структуры.

6. Анализ зависимости температуры плавления от размера кластера

- **Формула:**

$$T_{melt} = T_{bulk} = -\frac{c}{N^{1/3}}$$

- **Метод:** Линейная регрессия для определения T_{bulk} и c .

3.0.1 Ключевые особенности:

- **Стабильность:** Ограничение максимальных сил и скоростей для предотвращения численных ошибок.
- **Гибкость:** Поддержка различных “магических” чисел и размеров кластеров.
- **Автоматизация:** Интеграция всех этапов (генерация, моделирование, анализ, визуализация) в единый pipeline (`main.py`).

4 Выводы

Эти алгоритмы позволяют исследовать уникальные свойства нанокластеров, такие как оболочечное плавление и размерные эффекты, что соответствует целям работы.

Список литературы