Исследование плавления и затвердевания малых кластеров

Отчет по 2 этапу проекта

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

Содержание

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:
2. **Алгоритм Верле (скоростная форма)**
   * **Цель**: Интегрирование уравнений движения частиц с высокой точностью.
   * **Шаги**:
     1. Обновление скоростей на половину шага:
     2. Обновление позиций:
     3. Пересчёт ускорений на основе новых позиций.
     4. Завершение обновления скоростей:
3. **Расчёт термодинамических характеристик**
   * **Температура**:
   * где — скорость центра масс кластера, k — постоянная Больцмана.
   * **Флуктуации длины связи**:
   * **Теплоемкость**:
4. **Анализ фазовых переходов**
   * **Методы**:
     + **Пик теплоемкости**: Определяется через производную энергии по температуре.
   * **Критерий Линдеманна**: 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**:
   * **Метод**: Линейная регрессия для определения и .

### 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