

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный  
исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана)



**НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**  
**«Роль дальнодействия притяжения в фазовых диаграммах и диффузии  
в двумерных системах с регулируемыми взаимодействиями»**

Студент: Дмитрюк Никита  
гр. ФН4-81Б

Руководитель: Юрченко Станислав Олегович  
д.ф.-м.н., доцент каф. СМ13,  
МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Москва, 2020

## Актуальность

Для физики конденсированного состояния большой интерес представляют такие явления, как кристаллизация, плавление, критические явления, а также их зависимость от свойств системы. Понимание влияния этих свойств на систему играет важную роль в материаловедении. На данный момент эти проблемы решаются с использованием математических моделей систем.

## Цель работы

**Цель работы** – установить связь между дальнодействием притяжения в двумерной системе частиц, взаимодействующих посредством обобщенного потенциала Леннарда-Джонса, с фазовой диаграммой, и параметрами переноса.

## Задачи работы

1. Разработка программного комплекса для расчета явлений переноса в  $2D$  системах.
2. Разработка методов определения термодинамических свойств системы по распределениям плотностей.
3. Усовершенствование метода распознавание фаз и построения фазовых диаграмм.
4. Применение разработанных методов на различных потенциалах взаимодействия.
5. Применение наработок для изучения влияния потенциала взаимодействия на различные термодинамические параметры.

Разбиение на ячейки вороного

# Разбиение на ячейки вороного

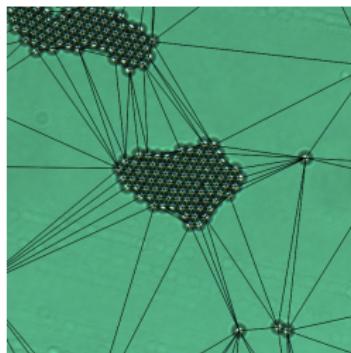
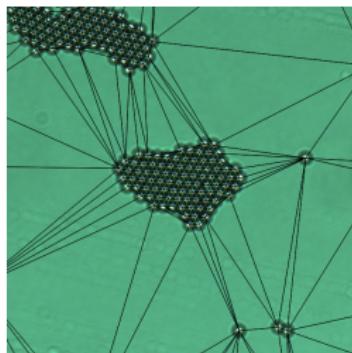


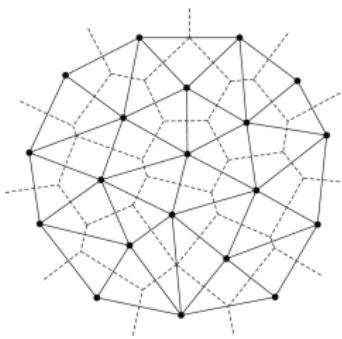
Рис. 1: Триангуляция  
Делоне

**Разбиение на ячейки вороного**

# Разбиение на ячейки вороного



**Рис. 1:** Триангуляция  
Делоне



**Рис. 2:** Проведение  
перпендикуляров

## Разбиение на ячейки вороного

## Разбиение на ячейки вороного

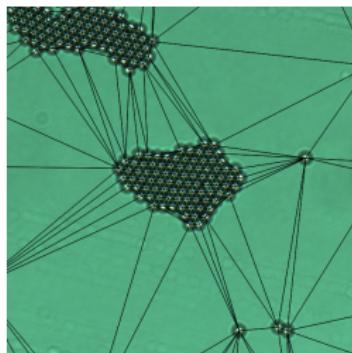


Рис. 1: Триангуляция  
Делоне

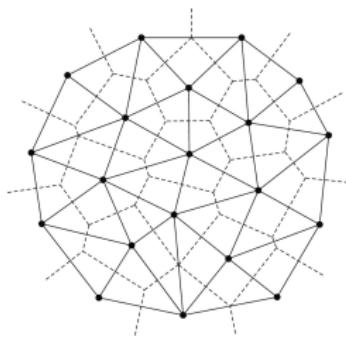


Рис. 2: Проведение  
перпендикуляров

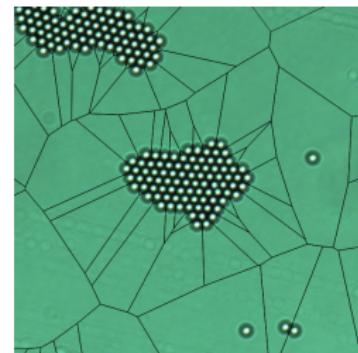
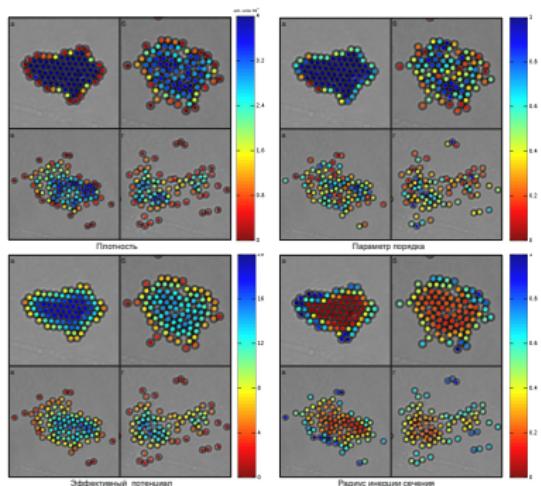


Рис. 3: Ячейки  
Вороного

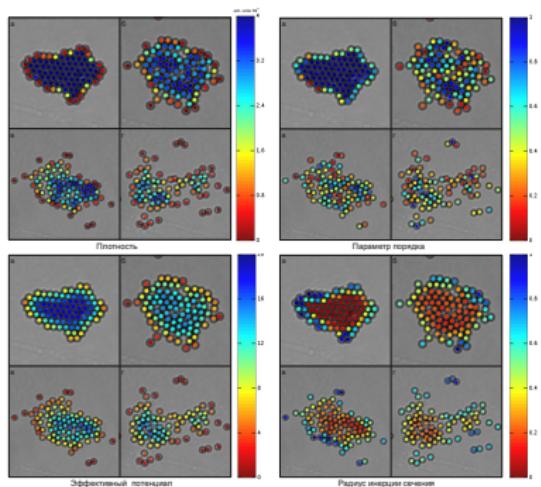
## Разбиение на ячейки вороного

## Разбиение на ячейки вороного



## Разбиение на ячейки вороного

## Разбиение на ячейки вороного



- ▶ Найти соседей каждой частицы
- ▶ Плотности
- ▶ Параметры порядка
- ▶ Эффективные потенциалы
- ▶ Радиусы инерции сечения
- ▶ И т.д.

Метод распознавания фаз

## Параметр иррегулярности $R$

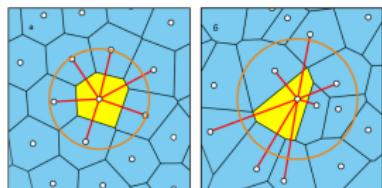


Рис. 4: а) Кристалл б) Газ.

## Метод распознавания фаз

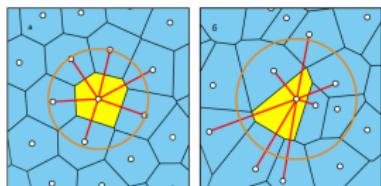
Параметр иррегулярности  $R$ 

Рис. 4: а) Кристалл б) Газ.

$$R_{0i} = \sqrt{\frac{\pi}{2S_i N_{ni}^2} \sum_{i < k}^{N_{ni}} (r_{ij} - r_{ik})^2}, r_{ij} = |r_i - r_j|$$

$$R_i = \frac{1}{N_{ni} + 1} \left( R_{0i} + \sum_{j=1}^{N_{ni}} R_{0j} \right) \quad (1)$$

где  $S_i$  - площадь ячейки,  $N_{ni}$  - количество соседей,  $r_{ij}$  - расстояние от рассматриваемой частицы до соседней.

## Метод распознавания фаз

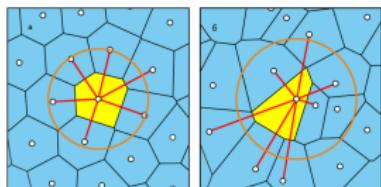
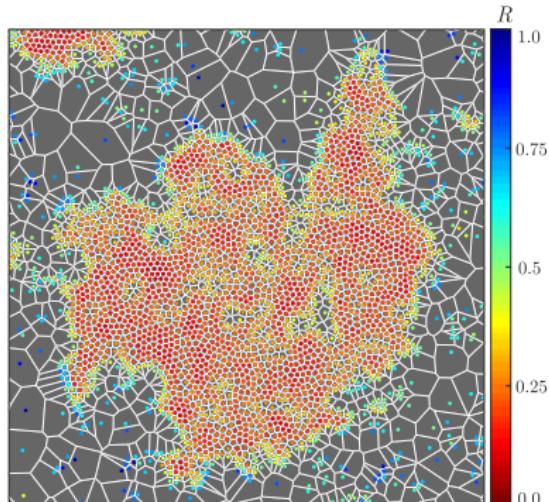
Параметр иррегулярности  $R$ 

Рис. 4: а) Кристалл б) Газ.

$$R_{0i} = \sqrt{\frac{\pi}{2S_i N_{ni}^2} \sum_{i < k}^{N_{ni}} (r_{ij} - r_{ik})^2}, r_{ij} = |r_i - r_j|$$

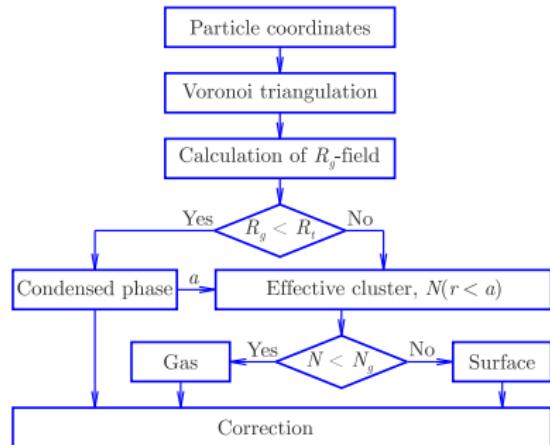
$$R_i = \frac{1}{N_{ni} + 1} \left( R_{0i} + \sum_{j=1}^{N_{ni}} R_{0j} \right) \quad (1)$$

где  $S_i$  - площадь ячейки,  $N_{ni}$  - количество соседей,  $r_{ij}$  - расстояние от рассматриваемой частицы до соседней.

Рис. 5: Распределение параметра  $R$ .

## Метод распознавания фаз

## Корректировка фаз



**Рис. 6:** Полный алгоритм классификации  
частиц в системе.

## Метод распознавания фаз

## Корректировка фаз

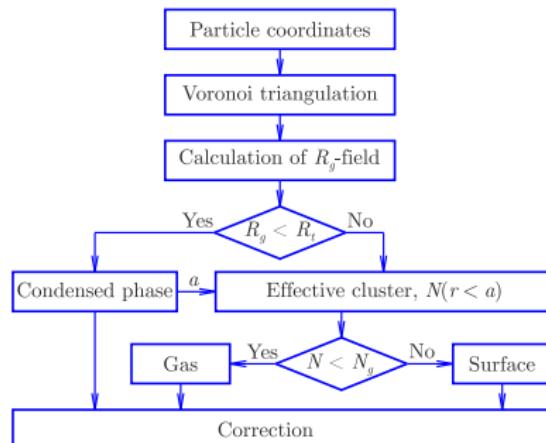


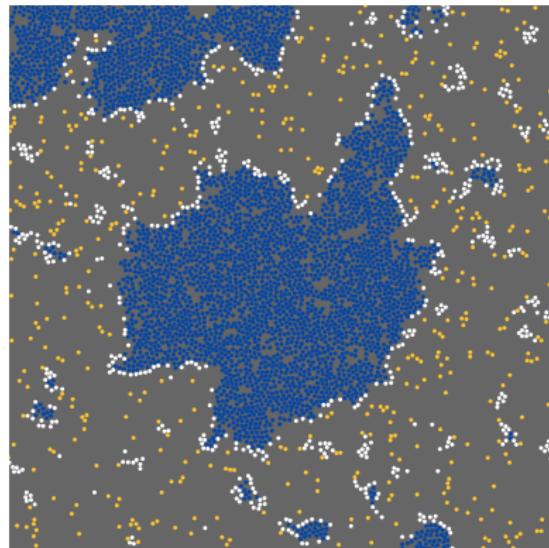
Рис. 6: Полный алгоритм классификации частиц в системе.

Корректировка фаз включает в себя следующие условия:

- ▶ частица конденсата, не имеющая среди своих соседей частиц того же типа, является поверхностью.
- ▶ частица конденсата, которая имеет среди соседних частиц, газовую частицу, является поверхностью.
- ▶ газовая частица, не имеющая соседних частиц того же класса, является поверхностью.
- ▶ частица поверхности, все соседи которой принадлежат к классу "конденсат" или "газ так же принадлежат к этому классу.

Метод распознавания фаз

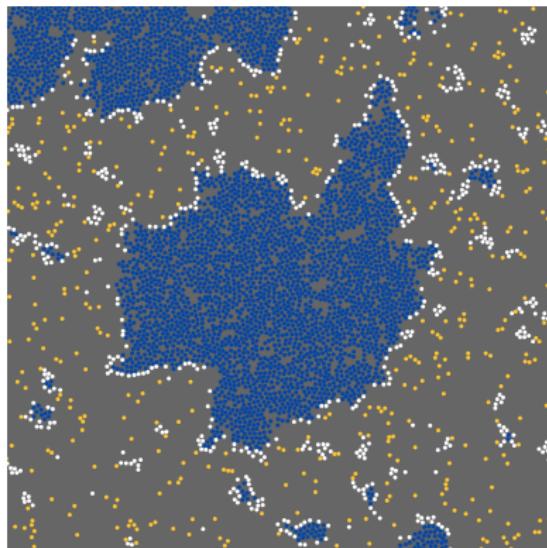
## Недостатки метода распознавания фаз



**Рис. 7:** Результат алгоритма классификации.

Метод распознавания фаз

## Недостатки метода распознавания фаз



**Рис. 7:** Результат алгоритма классификации.

Недостатки метода распознавания фаз:

- ▶ распознавание пустот внутри конденсированного кластера, как его часть.
- ▶ скопления поверхностных частиц, которые могут быть небольшими кластерами.
- ▶ нерегулярная граница кластера из поверхностных частиц.
- ▶ частицы на поверхности кластера с низкой плотностью, распознанные как конденсат а не поверхность, вносят ошибку в вычисления мат. ожидания плотности.

## Метод распознавания фаз

# Изменения в корректировке фаз

Дополнительные условия в корректировки фаз:

- ▶ частица поверхности, не имеющая среди соседей частиц газа, является конденсатом.
- ▶ поверхностная частица, не имеющая среди соседей частиц конденсата, является газом.
- ▶ частицы конденсата, плотность которых сопоставима с плотностью поверхностных частиц, являются поверхностью. Данная проверка делается дважды (перед всеми остальными и после).
- ▶ частица конденсата, которая имеет меньше 3 соседних частиц, так же принадлежащих к конденсату, является поверхностью.

## Метод распознавания фаз

# Изменения в корректировке фаз

Дополнительные условия в корректировки фаз:

- ▶ частица поверхности, не имеющая среди соседей частиц газа, является конденсатом.
- ▶ поверхностная частица, не имеющая среди соседей частиц конденсата, является газом.
- ▶ частицы конденсата, плотность которых сопоставима с плотностью поверхностных частиц, являются поверхностью. Данная проверка делается дважды (перед всеми остальными и после).
- ▶ частица конденсата, которая имеет меньше 3 соседних частиц, так же принадлежащих к конденсату, является поверхностью.

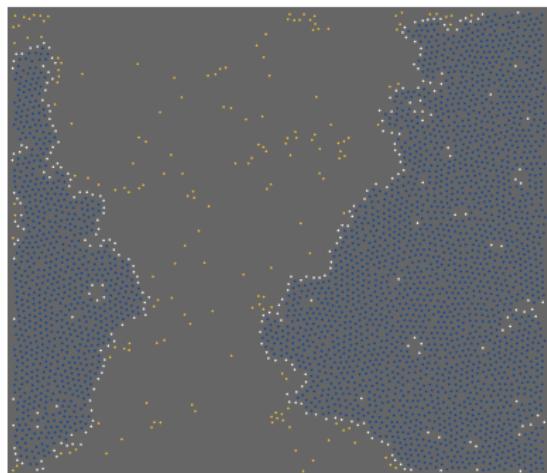
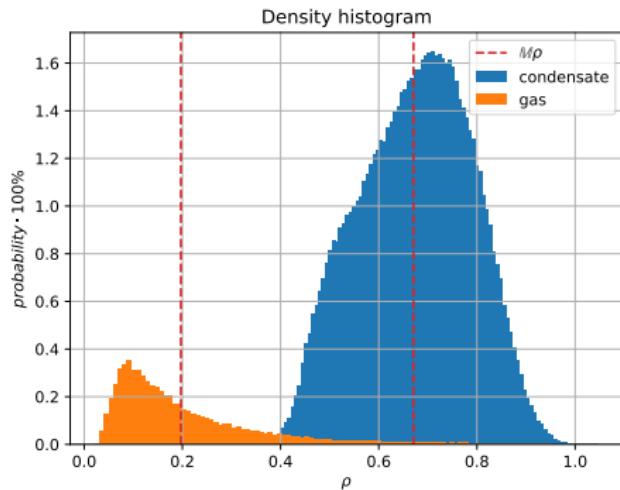


Рис. 8: Результат обновленного алгоритма классификации.

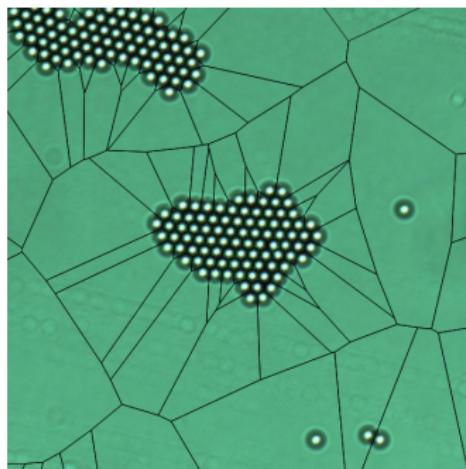
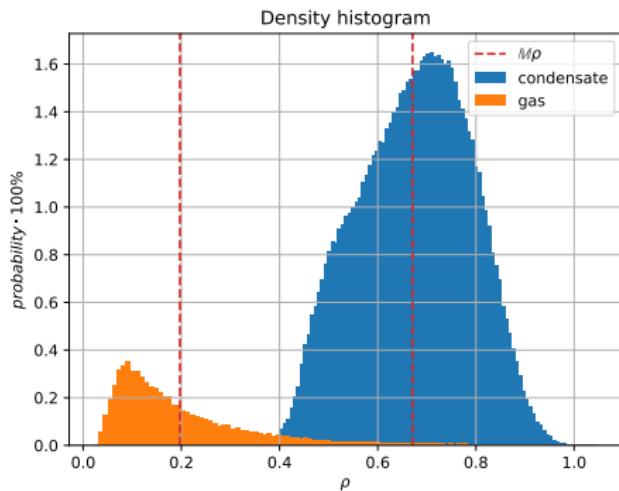
## Построение фазовой диаграммы

## Нахождение точек на фазовой диаграмме



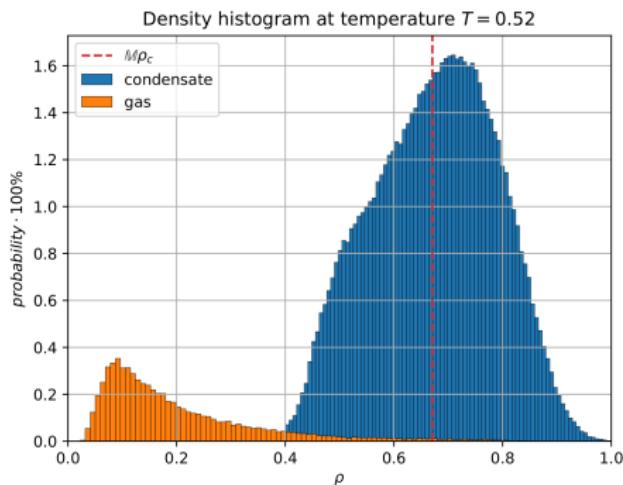
## Построение фазовой диаграммы

## Нахождение точек на фазовой диаграмме



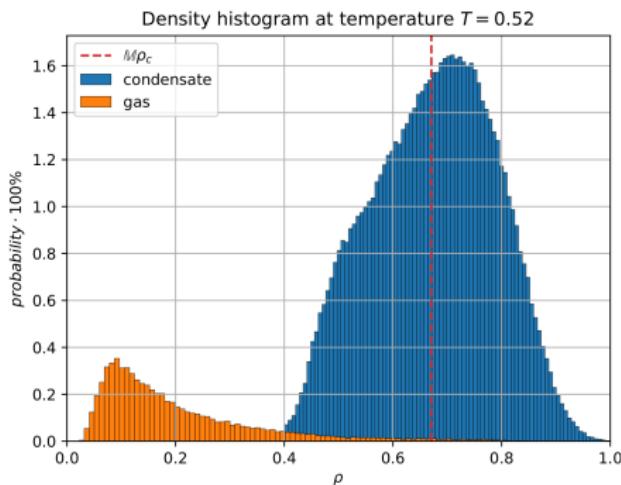
## Построение фазовой диаграммы

## Изменения в определении плотности газа



## Построение фазовой диаграммы

## Изменения в определении плотности газа

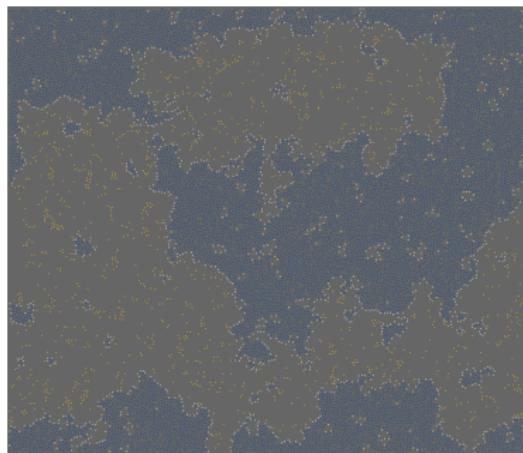


Плотность газа в системе  
вычисляется косвенно по формуле:

$$\rho_{gas} = \frac{N_g}{S - (N_b + N_c)/M\rho_c}, \quad (2)$$

где  $S$  - суммарная площадь всех  
рассматриваемых кадров,  $N_g$ ,  $N_b$ ,  $N_c$  -  
суммарное число частиц газа,  
поверхности и конденсата  
соответственно на всех  
рассматриваемых кадрах  
моделирования,  $M\rho_c$  - мат. ожидание  
плотности частиц конденсата на всех  
рассматриваемых кадрах.

# Описание симулированных систем



**Рис. 9:** Система LJ 12-6 при  $T/T_{cp} = 0.95$ .

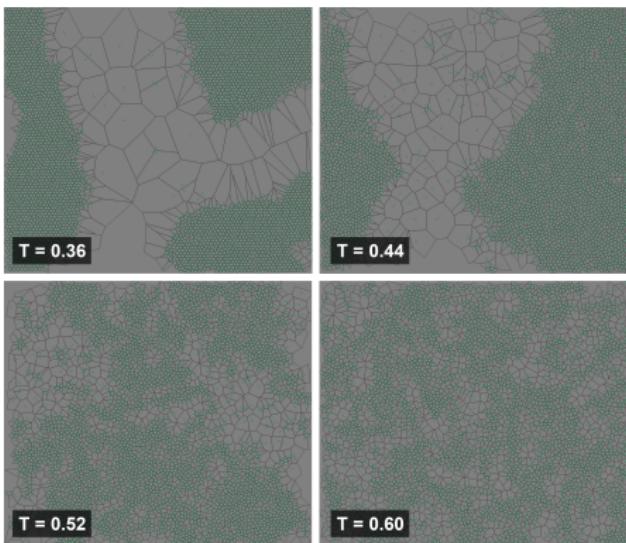
$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^m \right], m = 3, 4, 5, 6. \quad (3)$$

Каждое моделирование проводилось при постоянной температуре и плотности. Статистика собрана по 150 кадрам моделирования, на каждом из которых примерно по 3600 частиц. Все величины на графиках являются обезразмеренными с помощью  $\epsilon = 1$ ,  $\sigma = 1$ ,  $m = 1$ ,  $k_B = 1$ .

|            | LJ12-3 | LJ12-4 | LJ12-5 | LJ12-6 |
|------------|--------|--------|--------|--------|
| $m$        | 3      | 4      | 5      | 6      |
| $\Delta T$ | 0.03   | 0.03   | 0.02   | 0.02   |
| $\rho_0$   | 0.28   | 0.4    | 0.4    | 0.4    |

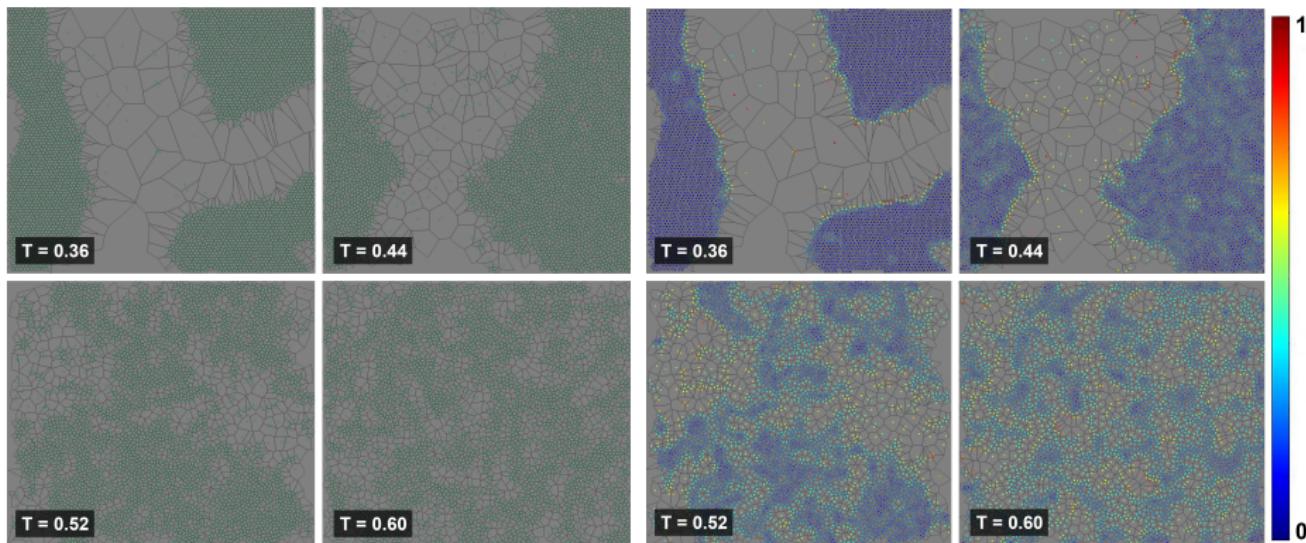
**Таблица 1:** Параметры моделирования исследуемых систем.  $m$  - степень слагаемого в уравнении 3,  $\Delta T$  - шаг по температуре,  $\rho_0$  - плотность системы в целом.

## Применение метода ячеек Вороного



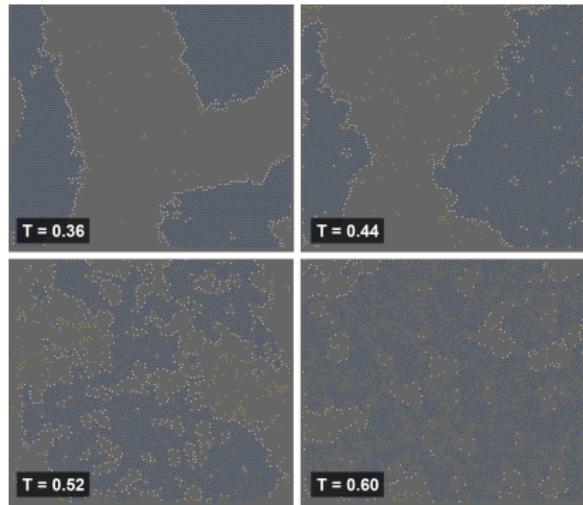
**Рис. 10:** Разбиение на ячейки Вороного различной температуре исследуемой в данной работе системы на примере потенциала Леннарда-Джонса.

## Применение метода ячеек Вороного

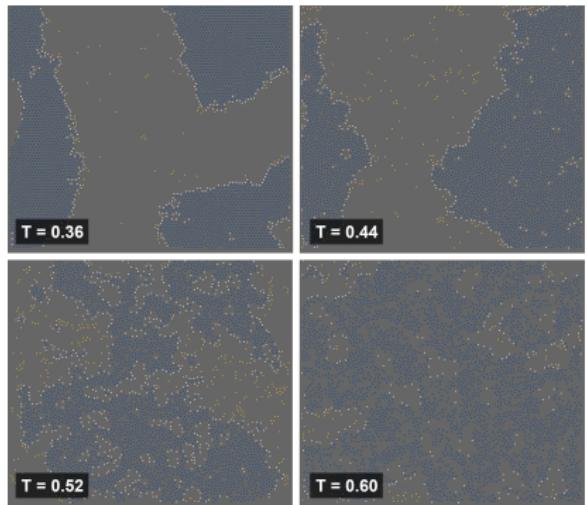


**Рис. 10:** Разбиение на ячейки Вороного различной температуре исследуемой в данной работе системы на примере потенциала Леннарда-Джонса.

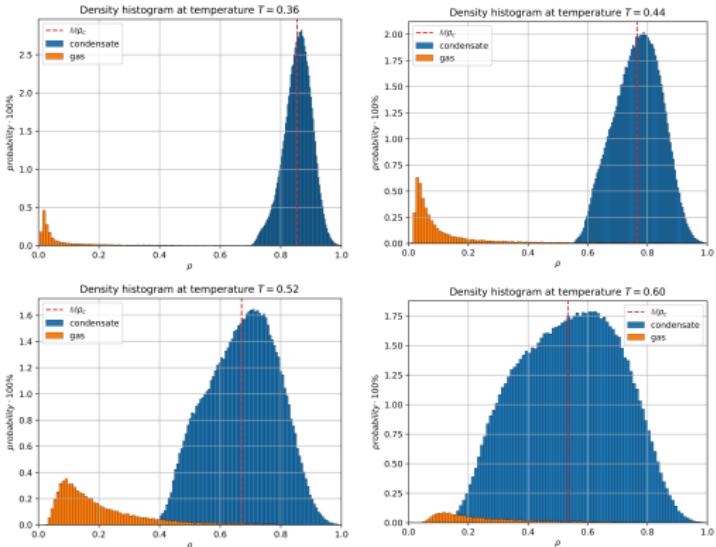
**Рис. 11:** Параметр иррегулярности  $R$  в исследуемой системе, на примере потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса при различной температуре.



**Рис. 12:** Классификация частиц в исследуемой системе на примере системы с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса при различной температуре.

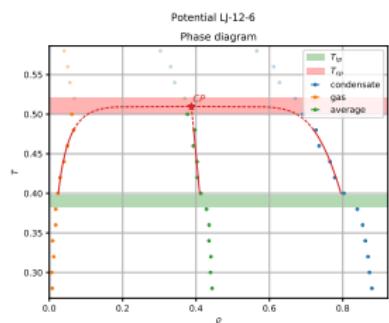
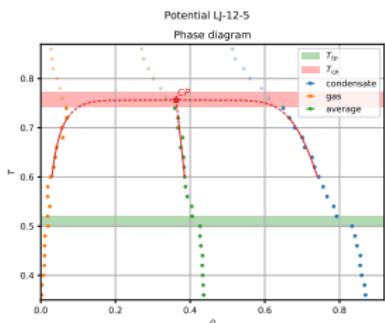
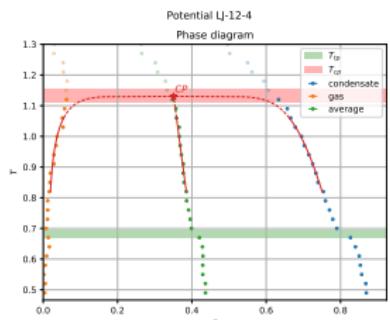
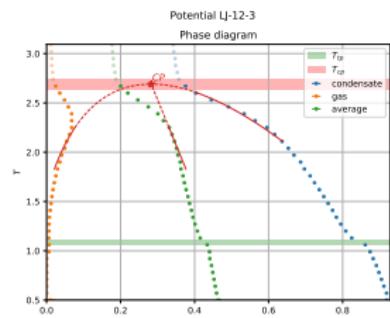


**Рис. 12:** Классификация частиц в исследуемой системе на примере системы с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса при различной температуре.

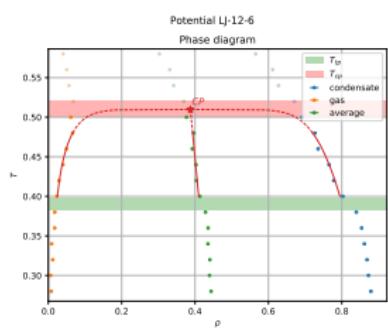
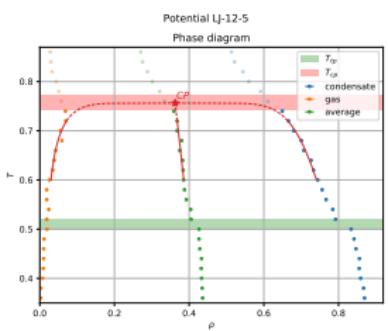
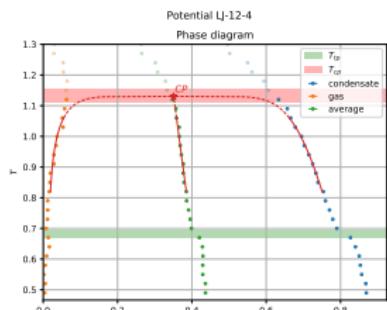
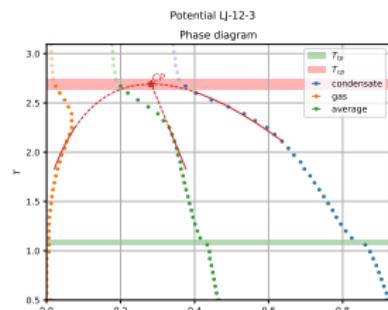


**Рис. 13:** Распределение плотностей частиц конденсата и газа при различных температурах. Синим цветом обозначен конденсат, оранжевым – газ.

# Фазовые диаграммы при различном притяжении



# Фазовые диаграммы при различном притяжении



|        | $T_{TP}$ | $T_{CP}$ | $\rho_{CP}$ |
|--------|----------|----------|-------------|
| LJ12-3 | 1.09     | 2.69     | 0.28        |
| LJ12-4 | 0.68     | 1.13     | 0.35        |
| LJ12-5 | 0.51     | 0.76     | 0.36        |
| LJ12-6 | 0.40     | 0.51     | 0.39        |

**Таблица 2:** Параметры фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия.  $T_{CP}$  - критическая температура,  $\rho_{CP}$  - критическая плотность системы,  $T_{TP}$  - температура тройной точки.

Введение

○○○

Глава 2

○○  
○○○○  
○○

Результаты главы 2

○○○○

Итоги ВКР

●

# Спасибо за внимание!