

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 дальнего действия притяжения в фазовых диаграммах и диффузии**  
**в двумерных системах с регулируемыми взаимодействиями»**

Студент:   Дмитрюк Никита  
гр. ФН4-81Б

Руководитель:   Юрченко Станислав Олегович

Москва, 2020

# Актуальность

Знание зависимости внешних параметров системы от потенциала взаимодействия, является открытым вопросом в физике мягкой материи. Точное прогнозирование, или хотя бы качественная их оценка, термодинамических параметров вещества, для которого известен состав и внешние условия (например, внешние электрические или магнитные поля), позволят избежать дорогостоящих исследований поведения каждого отдельного вещества.

Также это открывает возможности для создания новых веществ, удовлетворяющих потребности в определенном фазовом поведении, с нужными температурами плавления или скорости звука в веществе, а также сжимаемости.

## 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.

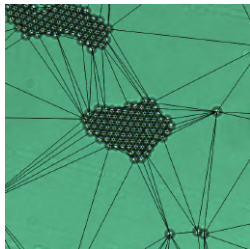
# Задачи работы

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.

# «ВЛИЯНИЕ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ ПРИТЯЖЕНИЯ НА ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ»

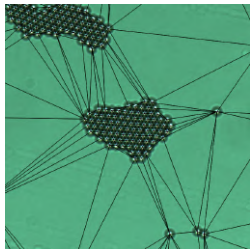
Разбиение на ячейки вороного

# Разбиение на ячейки вороного

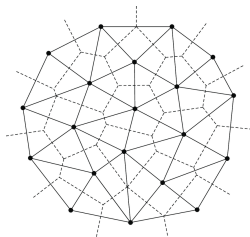


Триангуляция  
Делоне

# Разбиение на ячейки вороного

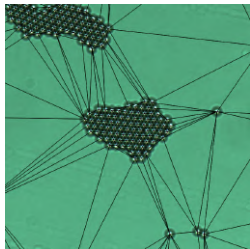


Триангуляция  
Делоне

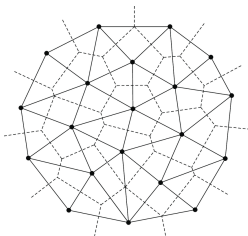


Проведение  
перпендикуляров

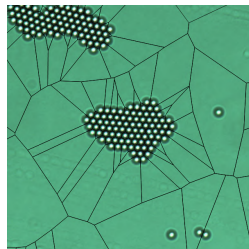
# Разбиение на ячейки вороного



Триангуляция  
Делоне



Проведение  
перпендикуляров

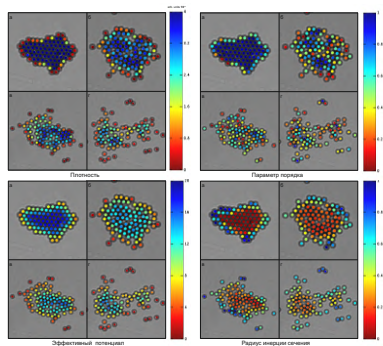


Ячейки Вороного

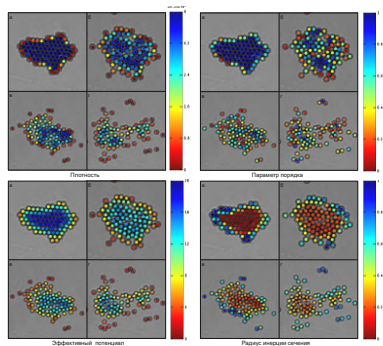


Разбиение на ячейки вороного

# Разбиение на ячейки вороного

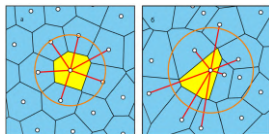


# Разбиение на ячейки вороного



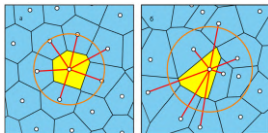
- ▶ Найти соседей каждой частицы
- ▶ Плотности
- ▶ Параметры порядка
- ▶ Эффективные потенциалы
- ▶ Радиусы инерции сечения
- ▶ И т.д.

## Параметр иррегулярности $R$



а) Кристалл б) Газ.

## Параметр иррегулярности $R$

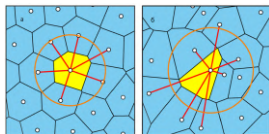


а) Кристалл б) Газ.

$$R_{0i} = \sqrt{\frac{\pi}{2S_i N_{ni}^2} \sum_{i < k}^{N_{ni}} (r_{ij} - r_{ik})^2, r_{ij} = |r_i - r_j|}$$
$$R_i = \frac{1}{N_{ni} + 1} \left( R_{0i} + \sum_{j=1}^{N_{ni}} R_{0j} \right) \quad (1)$$

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

# Параметр иррегулярности $R$

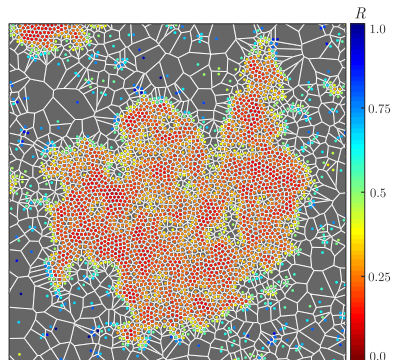


а) Кристалл б) Газ.

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

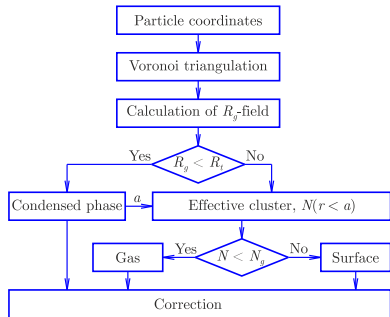
$$R_i = \frac{1}{N_{ni} + 1} \left( R_{0i} + \sum_{j=1}^{N_{ni}} R_{0j} \right) \quad (1)$$

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



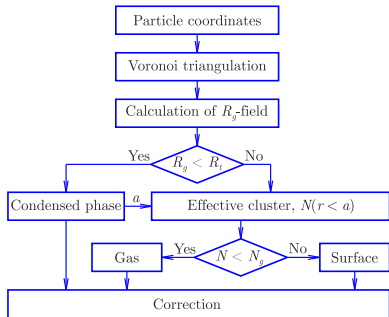
Распределение параметра  $R$ .

# Корректировка фаз



**Полный алгоритм классификации частиц в системе.**

# Корректировка фаз

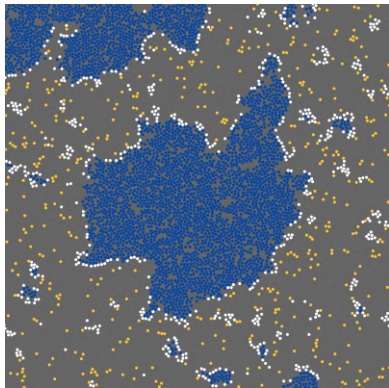


Полный алгоритм классификации частиц в системе.

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.

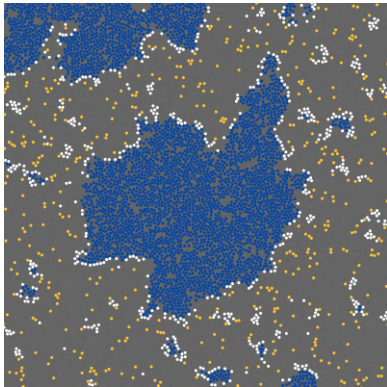
## Недостатки метода распознавания фаз



Результат алгоритма классификации.



## Недостатки метода распознавания фаз



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.

## Изменения в корректировке фаз

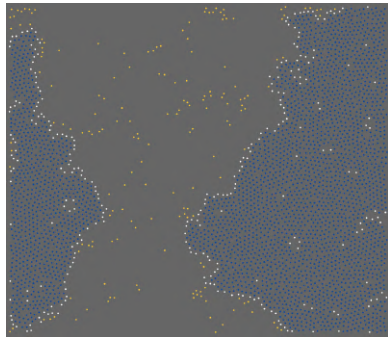
Дополнительные условия в корректировке фаз:

- ▶ 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.

## Изменения в корректировке фаз

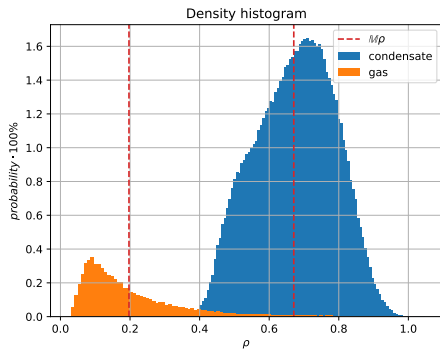
Дополнительные условия в корректировке фаз:

- ▶ 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.

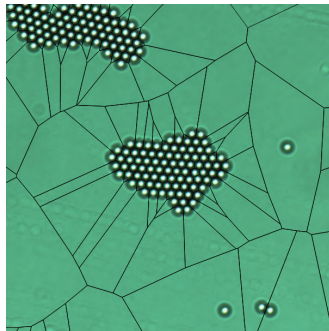
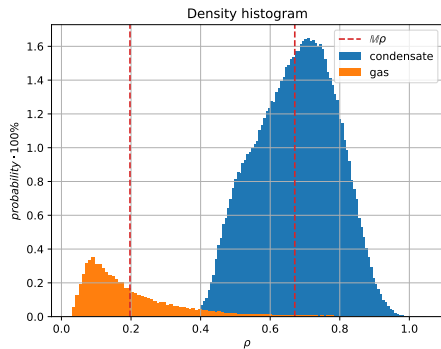


Результат обновленного алгоритма классификации.

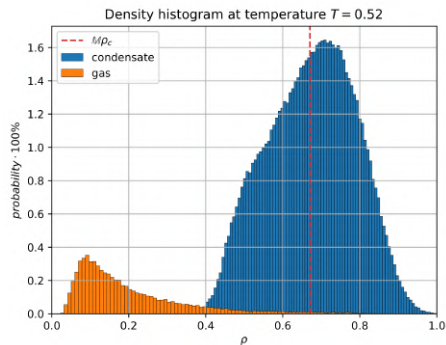
# Нахождение точек на фазовой диаграмме



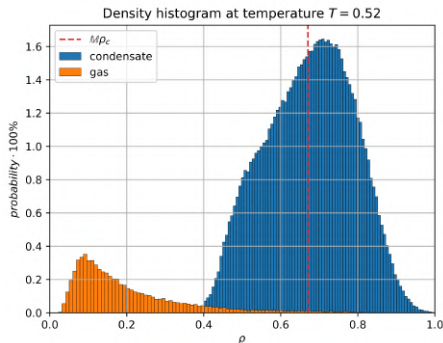
## Нахождение точек на фазовой диаграмме



# Изменения в определении плотности газа



# Изменения в определении плотности газа

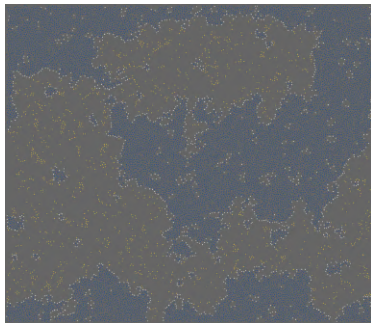


Плотность газа в системе  
вычисляется косвенно по формуле:

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

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,  $\mathbb{M}\rho_c$  - мат. ожидание плотности частиц конденсата на всех рассматриваемых кадрах.

## Описание смоделированных систем



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

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

Каждое моделирование проводилось при постоянной температуре и плотности.

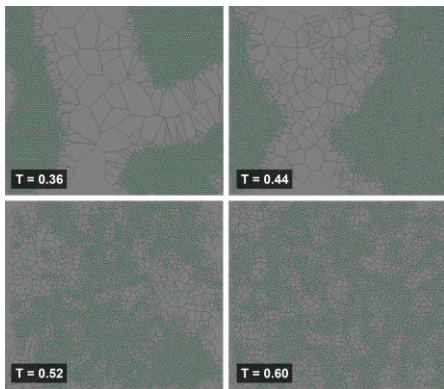
Статистика собрана по 150 кадрам моделирования, на каждом из которых примерно по 3600 частиц. Все величины на графиках являются обезразмеренными с помощью  $\varepsilon = 1, \sigma = 1, m = 1, k_B = 1$ .

	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

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

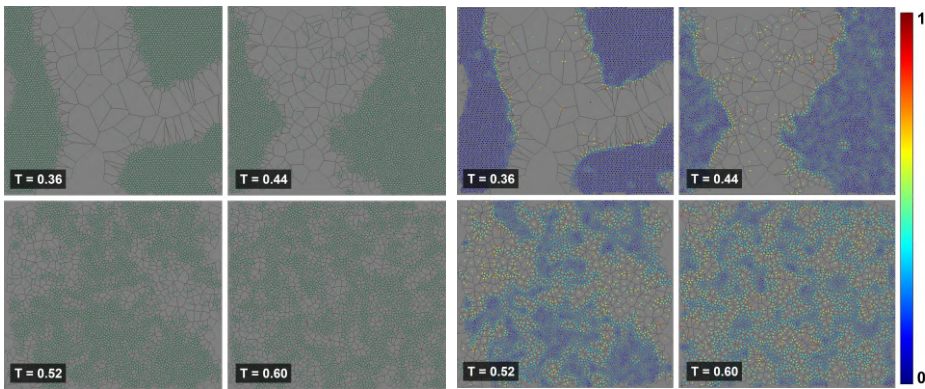


## Применение метода ячеек Вороного



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

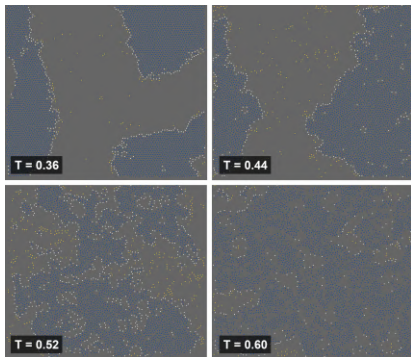
## Применение метода ячеек Вороного



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

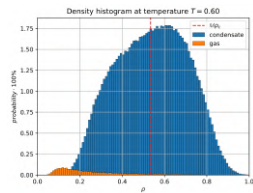
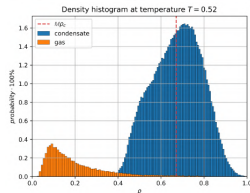
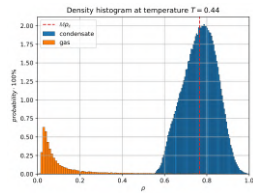
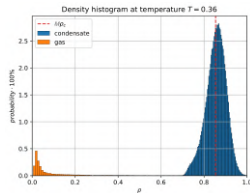
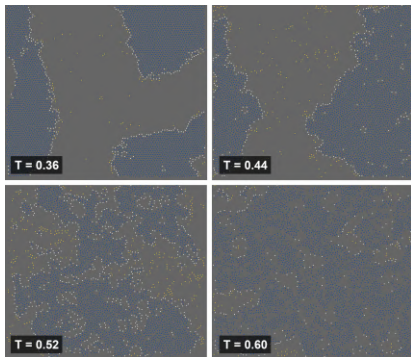
Параметр иррегулярности  $R$  в исследуемой системе, на примере потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса при различной температуре.

## Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия



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

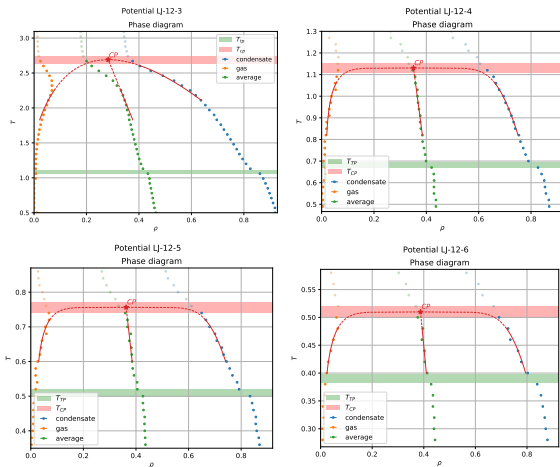
## Построение фазовых диаграмм для различных потенциалов взаимодействия



Классификация частиц в исследуемой системы на примере системы с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса при различной температуре.

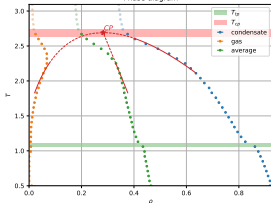
Распределение плотностей частиц конденсата и газа при различных температурах. Синим цветом обозначен конденсат, оранжевым - газ.

# Фазовые диаграммы при различном притяжении

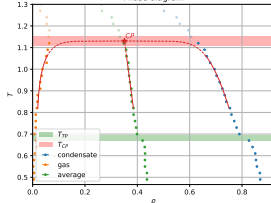


# Фазовые диаграммы при различном притяжении

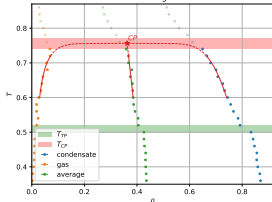
Potential LJ-12-3  
Phase diagram



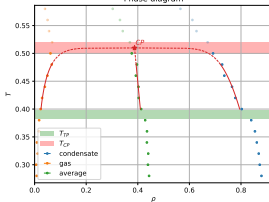
Potential LJ-12-4  
Phase diagram



Potential LJ-12-5  
Phase diagram



Potential LJ-12-6  
Phase diagram



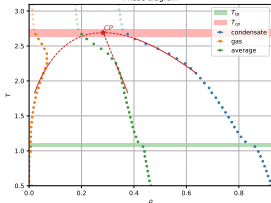
$$\rho_l - \rho_g \simeq A(T_{CP} - T)^{\beta_c}$$

$$\frac{\rho_l + \rho_g}{2} \simeq \rho_{CP} + a(T_{CP} - T) \quad (4)$$

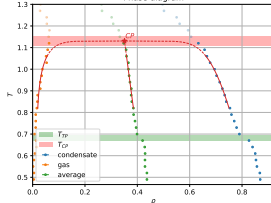
где  $T_{CP}$ ,  $\rho_{CP}$  - эффективная температура и плотность критической точки,  $A$ ,  $a$  - варьируемые параметры,  $\rho_l$ ,  $\rho_g$  - плотность жидкости и газа соответственно,  $\beta_c$  - критический индекс системы.

# Фазовые диаграммы при различном притяжении

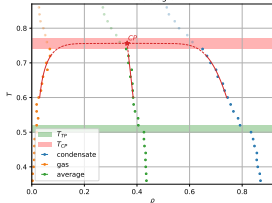
Potential LJ-12-3  
Phase diagram



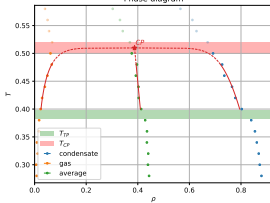
Potential LJ-12-4  
Phase diagram



Potential LJ-12-5  
Phase diagram



Potential LJ-12-6  
Phase diagram



$$\rho_l - \rho_g \simeq A(T_{CP} - T)^{\beta_c} \quad (4)$$

$$\frac{\rho_l + \rho_g}{2} \simeq \rho_{CP} + a(T_{CP} - T)$$

где  $T_{CP}$ ,  $\rho_{CP}$  - эффективная температура и плотность критической точки,  $A$ ,  $a$  - варьируемые параметры,  $\rho_l$ ,  $\rho_g$  - плотность жидкости и газа соответственно,  $\beta_c$  - критический индекс системы.

	$T_{TP}$	$T_{CP}$	$\rho_{CP}$
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

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

# Анализ гистограмм распределения плотностей

Равновесные колебания вблизи среднего значения объема определяются уравнением состояния системы, и соответствующая функция распределения вероятности  $p(V)$  равна:

$$p(V) \propto \exp \left[ \frac{1}{2T} \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right) (V - V_0)^2 \right], \quad (5)$$

где  $P$  - давление,  $V_0$  - максимум распределения объема,  $V$  - объем. Сделав замену  $V = 1/\rho$ , получим следующее уравнение для аппроксимации вершины гистограмм:

$$p(\rho) \propto \exp \left[ -K (\rho_{max} - \rho)^2 \right] \\ K = \frac{1}{2T\rho_{max}^2} \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right) \quad (6)$$

где  $\rho_{max}$  - плотность максимума распределения.



# Анализ гистограмм распределения плотностей

Равновесные колебания вблизи среднего значения объема определяются уравнением состояния системы, и соответствующая функция распределения вероятности  $p(V)$  равна:

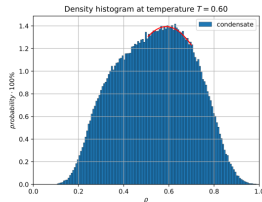
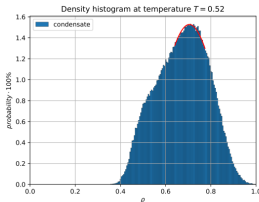
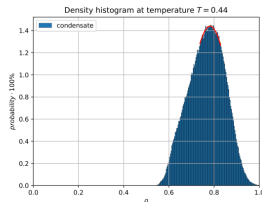
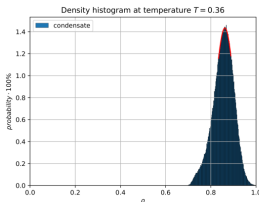
$$p(V) \propto \exp \left[ \frac{1}{2T} \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right) (V - V_0)^2 \right], \quad (5)$$

где  $P$  - давление,  $V_0$  - максимум распределения объема,  $V$  - объем. Сделав замену  $V = 1/\rho$ , получим следующее уравнение для аппроксимации вершины гистограмм:

$$p(\rho) \propto \exp \left[ -K (\rho_{max} - \rho)^2 \right] \quad (6)$$

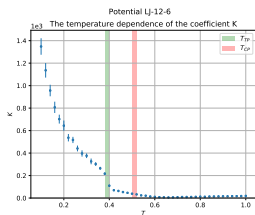
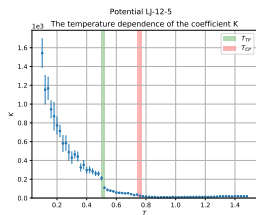
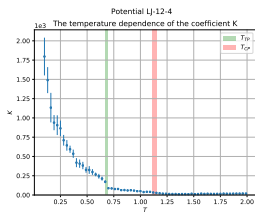
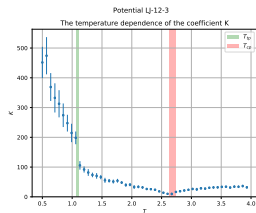
$$K = \frac{1}{2T\rho_{max}^2} \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)$$

где  $\rho_{max}$  - плотность максимума распределения.



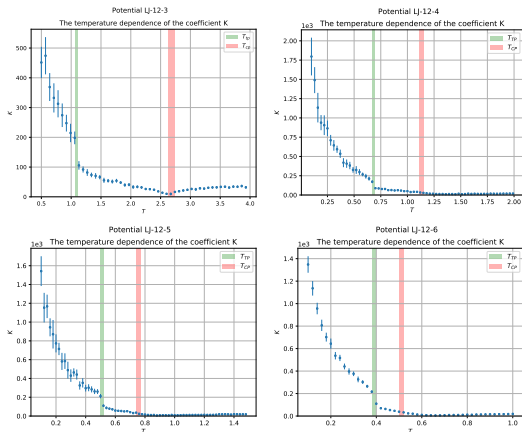
Аппроксимация пика распределения плотности при различной температуре на примере потенциала LJ12-6.

## Анализ гистограмм распределения плотностей



Температурная зависимость коэффициента  $K$ .

## Анализ гистограмм распределения плотностей



По коэффициенту  $K$  можно определить сжимаемость и адиабатическая скорость звука:

$$\beta = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial P}$$

$$C = \sqrt{\frac{\partial P}{\partial \rho}}, \quad (7)$$

где  $\beta$  - сжимаемости,  $C$  - скорость звука в веществе.

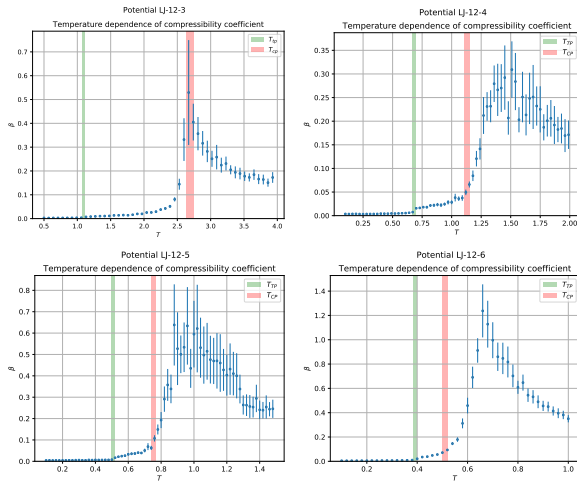
Выразив данные величины через коэффициент  $K$ , получим следующие формулы:

$$\beta = \frac{1}{2T\rho_0\rho_{max}^2 K}$$

$$C = \rho_{max} \sqrt{2TK} \quad (8)$$

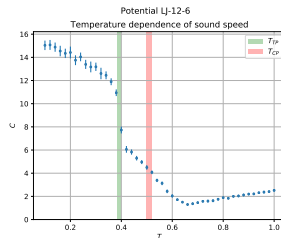
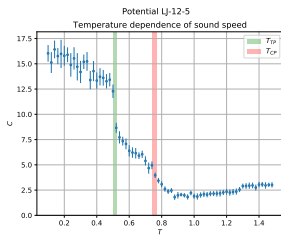
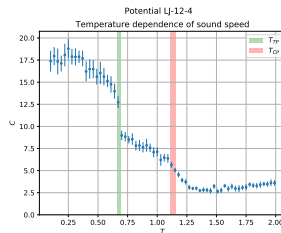
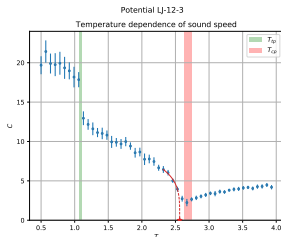
Температурная зависимость коэффициента  $K$ .

## Анализ гистограмм распределения плотностей



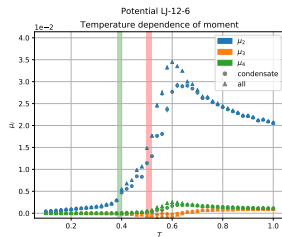
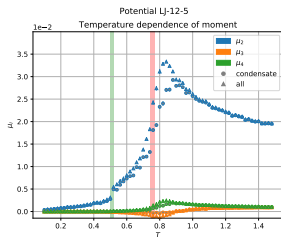
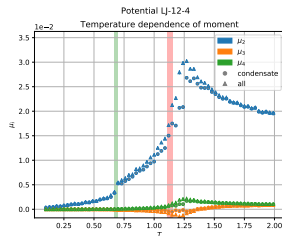
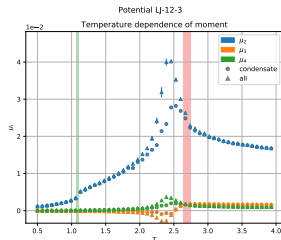
Температурная зависимость  $\beta$  при различных потенциалах.

## Анализ гистограмм распределения плотностей



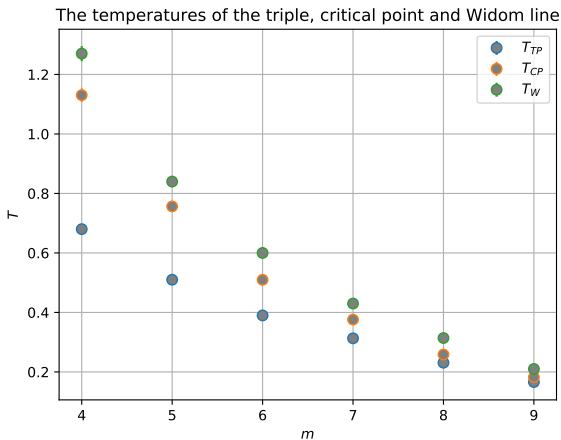
Температурная зависимость скорости звука при различных потенциалах.

## Анализ гистограмм распределения плотностей



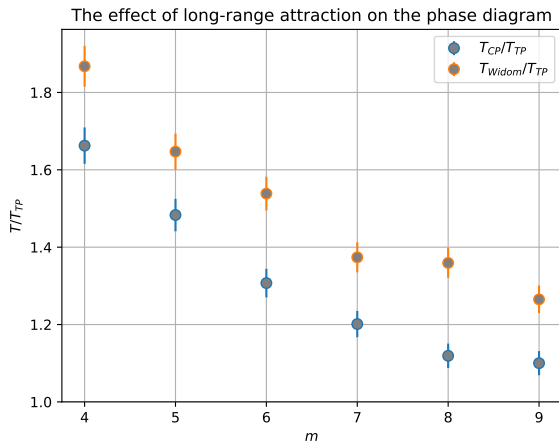
Температурная зависимость моментов величины  $\mu_i = \mathbb{M} \left[ |\rho - \mathbb{M}\rho|^i \right]$ .

## Влияние дальнего действия притяжения



Зависимость температур тройной, критической точки и линии Видома в зависимости от степени  $m$ .

## Влияние дальнего действия притяжения

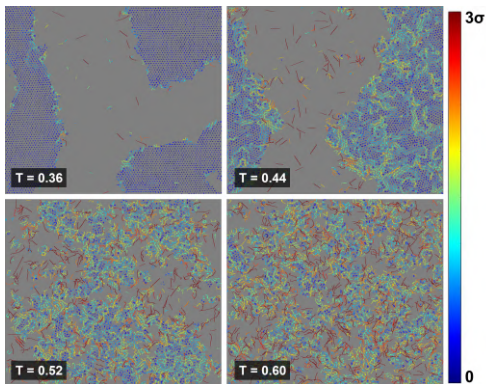


Отношение температур критической точки и линии Видома к тройной в зависимости от степени  $m$ .



## «ДИФфуЗИЯ ОТ ТРОЙНОЙ ДО КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ»

## Вычисление коэффициента диффузии методами МД



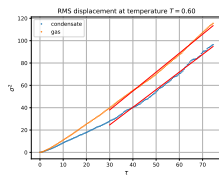
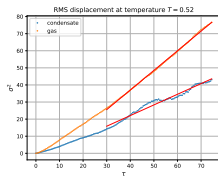
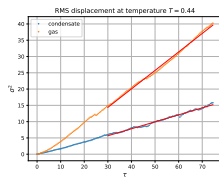
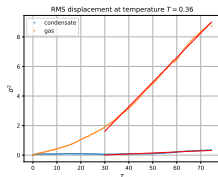
Зная смещения всех частиц от их изначального положения в системе, с  $t = 0$ , можно рассчитать среднеквадратичное смещение частиц с помощью уравнения:

$$\sigma^2(t) = \sum_{\alpha=1}^{N(t)} (r_{\alpha}(t) - r_{\alpha}(0))^2 / N(t), \quad (9)$$

где  $\sigma^2(t)$  - среднеквадратичное смещение частиц,  $N(t)$  - количество частиц в данный момент времени в кадре,  $r_{\alpha}(t)$  - положение частицы в момент времени  $t$ ,  $r_{\alpha}(0)$  - положение частицы в начальный момент времени  $t = 0$ .

Смещение частиц от начального положения за 10 кадров моделирования. Цветом показана величина смещения в  $\sigma$  (единица измерения длины).

# Вычисление коэффициента диффузии методами МД



Так как для двумерной системы верно равенство  $\sigma^2(t) = 4Dt$ , то коэффициент диффузии выражается следующей формулой:

$$D = \frac{\sigma^2(t)}{4t}, \quad (10)$$

где  $D$  - коэффициент диффузии в веществе.

Его можно получить путем аппроксимации среднеквадратичного смещения функцией  $\sigma^2(t) = 4Dt + a$ , где  $a$  - подгоночный коэффициент.

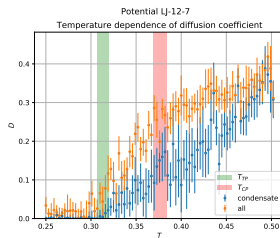
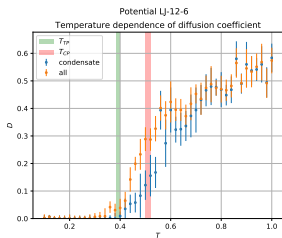
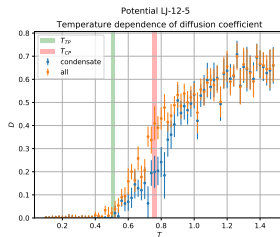
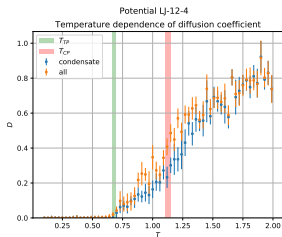
Кроме диффузии можно вычислить мобильность частиц в системе, которая определяется следующим уравнением:

$$\mu = \frac{D}{T}, \quad (11)$$

Временная зависимость среднеквадратичного смещения частиц для различных температур на примере потенциала Леннарда-Джонса.

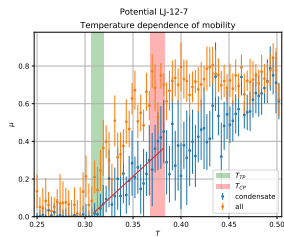
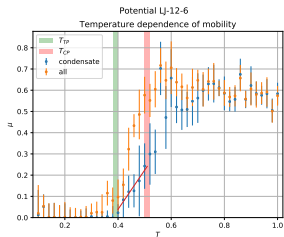
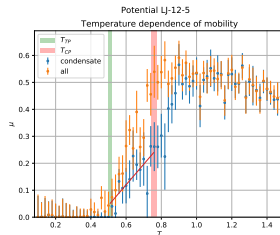
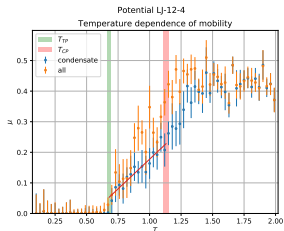
где  $\mu$  - мобильность частиц.

## Температурная зависимость диффузии и подвижности



Температурная зависимость коэффициента диффузии для различных потенциалов взаимодействия. Не доделана!

## Температурная зависимость диффузии и подвижности



Температурная зависимость подвижности для различных потенциалов взаимодействия.

## Влияние дальнего действия притяжения на подвижность частиц

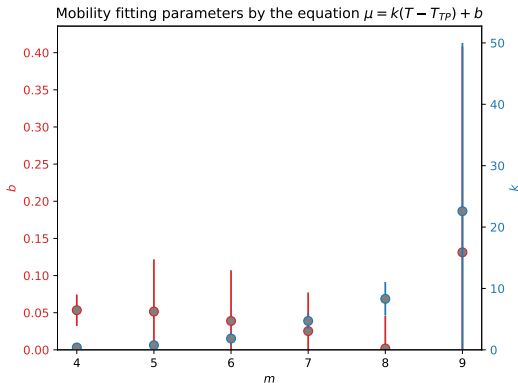
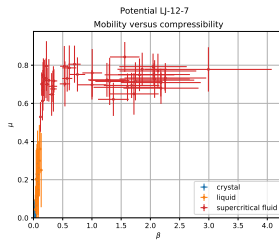
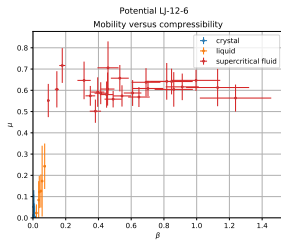
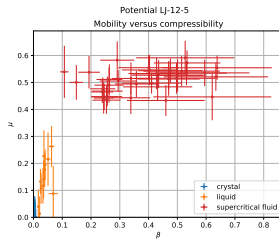
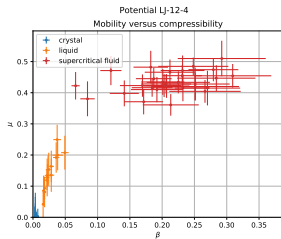


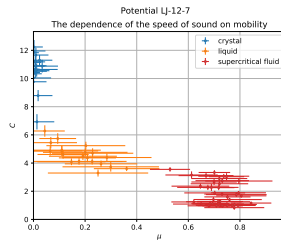
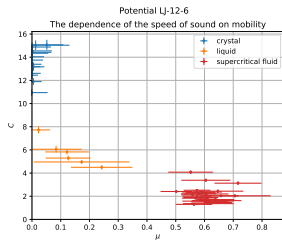
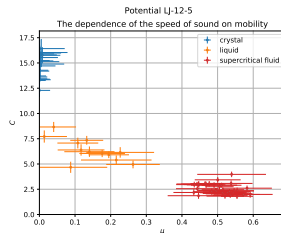
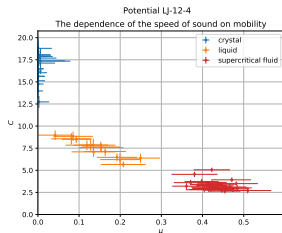
График зависимости параметров аппроксимации подвижности от тройной до критической точки линейной функцией.

## Взаимосвязь термодинамических параметров, и параметров переноса



Зависимость мобильности от сжимаемости для различных потенциалов.

## Взаимосвязь термодинамических параметров, и параметров переноса



Зависимость скорости звука от мобильности для различных потенциалов. Не доделана!



## Выводы работы

1. Проведена модернизация алгоритма классификации и определение плотностей фаз в системе.
2. Установлена роль притяжения на фазовые диаграммы систем с обобщенным потенциалом Леннарда - Джонса.
3. Представлен способ определения сжимаемости и скорости звука в веществе, используя только распределение плотностей ячеек вороного, а так же способ определения линии Видома для плотности.
4. Исследована зависимость поведения мобильности частиц в зависимости от дальнегодействия притяжения.
5. Рассмотрена связь термодинамических свойств системы с параметрами переноса в веществе, предложен способ классификации с помощью нейронной сети.

Спасибо за внимание!