

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



**КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРА ТЕХНИКА И ТЕХНОЛОГИИ  
ПО НАПРАВЛЕНИЮ 14040000.62 «ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»**

**НА ТЕМУ:**

**«РОЛЬ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ ПРИТЯЖЕНИЯ  
В НУКЛЕАЦИИ И В КОЛЛЕКТИВНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЯХ»**

**Выполнил:**

**Дмитрюк Никита Александрович**  
студент группы ФН4-41М

**Научный руководитель:**

**Юрченко Станислав Олегович**  
д.ф.-м.н., профессор кафедры физики  
МГТУ им. Н.Э. Баумана

**Москва, 2022**

# Актуальность

**Актуальность данной работы заключается в следующем:**

- Нет точных данных о том, как потенциал взаимодействия частиц влияет на транспортные свойства вещества, в том числе температурные зависимости диффузии и подвижности.
- Неизвестно, существует ли корреляция между диффузией и спектрами возбуждений в жидкой фазе веществ.
- Неизвестно, каким образом дальнодействие притяжения влияет на скорость процесса кристаллообразования.

## Цель работы

**Цель работы** – установить связь дальнодействия потенциала и спектров возбуждений с транспортными свойствами жидкостей, а также его влияние на скорость нуклеации.

# Задачи работы

**Задачами работы являются:**

- Расчет фазовых диаграмм обобщенного потенциала Леннарда-Джонса.
- Расчет и анализ транспортных свойств и коллективных возбуждений на жидкостных бинодалах.
- Адаптация метода кластеризации данных DBSCAN для МД моделирований.
- Расчет фазовых диаграмм для 2D и 3D систем частиц, взаимодействующих посредством обобщенного нормированного потенциала Леннарда-Джонса с различными степенями притяжения.
- Сравнение нового метода с другими алгоритмами распознавания фаз и построения фазовых диаграмм.
- Проведение тестов на устойчивость метода к изменению средней плотности системы и параметров моделирования.
- Применение нового метода распознавания фаз для изучения скорости нуклеации в переохлажденных системах Леннарда-Джонса с различным дальнодействием притяжения.

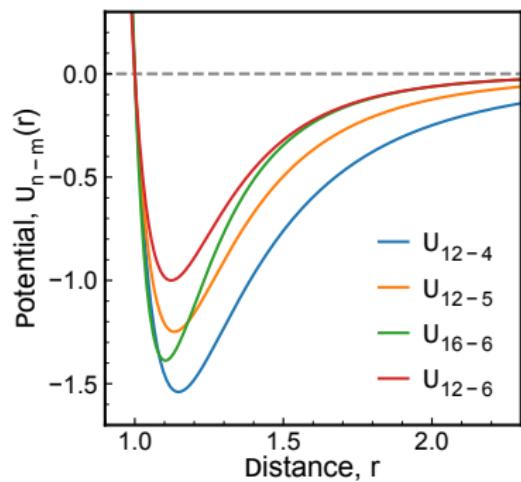
# **«ВЛИЯНИЕ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ ПРИТЯЖЕНИЯ НА ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ И КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ»**

# Параметры моделирований

LJ<sub>n-m</sub>

$$U_{n-m}(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^m \right]$$

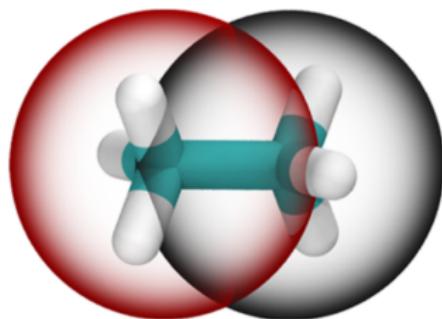
где  $\epsilon = 1$  и  $\sigma = 1$  - магнитуда и  
характерный масштаб отталкивания  
соответственно.



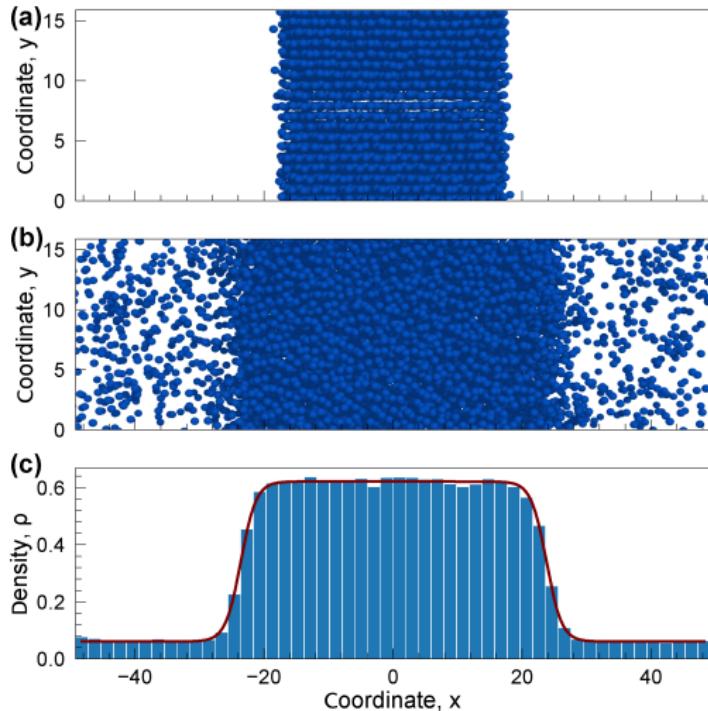
Ethane

$$U_{ethane}(r) = \tilde{\epsilon} \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{16} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right],$$

где  $\tilde{\epsilon} = 0.695$  ккал/моль;  $\sigma = 3.783\text{\AA}$ .



# Построение фазовых диаграмм



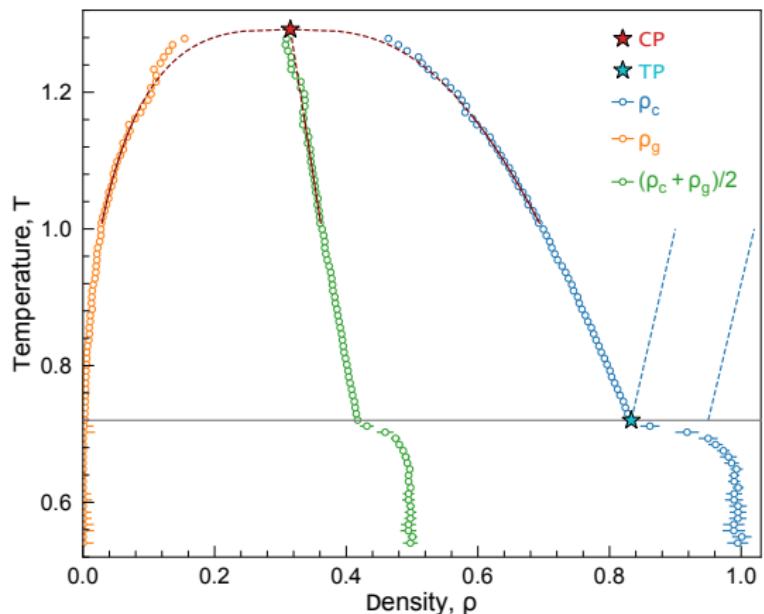
$$\rho(x) = \frac{\rho_c + \rho_g}{2} - \frac{\rho_c - \rho_g}{2} \tanh\left(\frac{|x| - L}{\delta}\right)$$

где  $L$  - половина размера области конденсированной фазы;  
 $\delta$  - характерная толщина интерфейса.

$LJn-m$	$\rho$	$r_c$	$T_{start}$	$T_{stop}$
$LJ12-4$	0.25	15.0	1.0	5.5
$LJ12-5$	0.25	10.0	0.8	2.4
$LJ12-6$	0.35	8.0	0.5	1.4
$LJ16-6$	0.31	8.0	0.8	1.6

# Построение фазовых диаграмм

Фазовая диаграмма системы LJ12-6.



$$\rho_c - \rho_g \simeq A\tau^\beta, \quad \rho_c + \rho_g \simeq a\tau + 2\rho_{CP},$$

где  $\tau = T_{CP} - T$ ;

$T_{CP}$  и  $\rho_{CP}$  - температура и плотность в критической точке соответственно;  
 $\beta$  - критический индекс.

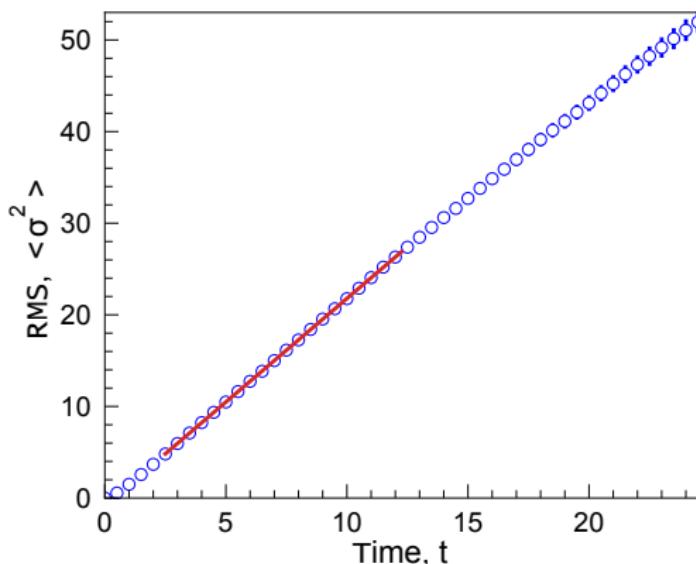
$\beta = 0.5$  для LJ12-4 и  $\beta = 0.325$  для других рассматриваемых потенциалов.

E. Luijten et al., Physical Review Letters 89, 025703 (2002).

F. Biscay, et al., The Journal of Physical Chemistry B 112, 13885 (2008).

# Вычисление диффузии и спектров в жидкости

Зависимость среднеквадратичного смещения Среднеквадратичное смещение частиц:  
частиц от времени.



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

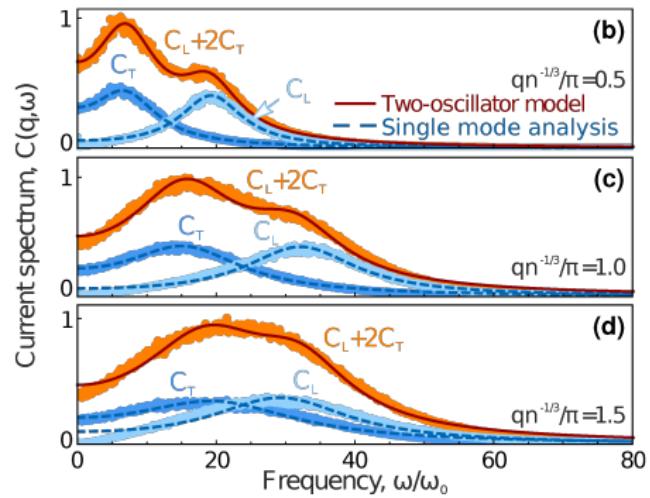
$$\sigma^2(t) = 6 \cdot D \cdot t$$

где  $D$  - коэффициент диффузии;  
 $\sigma$  - среднеквадратичное смещение;  
 $t$  - время;  
 $N$  - количество частиц.

Подвижность частиц  $\mu$  связана с диффузией:

$$\mu = \frac{D}{T}$$

# Вычисление диффузии и спектров в жидкости



Спектр потока скорости:

$$C_{L,T}(q, \omega) = \int dt e^{i\omega t} \operatorname{Re} \langle j_{L,T}(q, t) j_{L,T}(-q, 0) \rangle$$

где  $j(q, t) = N^{-1} \sum_s v_s(t) \exp(iqr_s(t))$

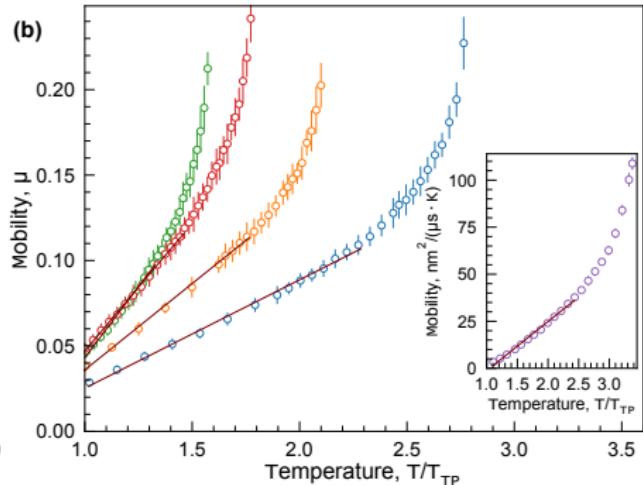
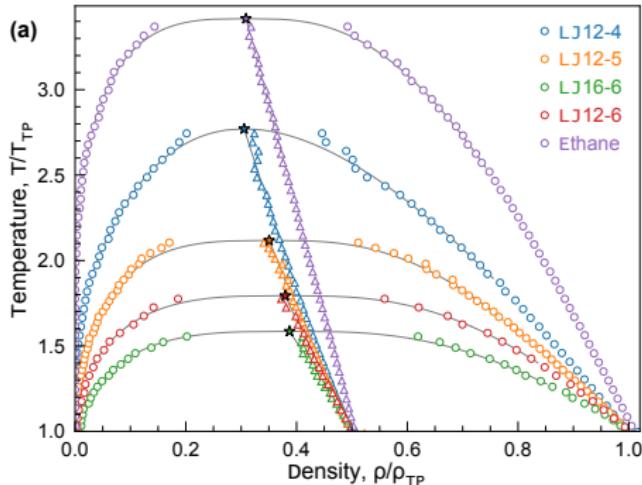
Полный спектр потока скорости  $C(q, \omega) = C_L(q, \omega) + (D - 1)C_T(q, \omega)$ :

$$C(q, \omega) \propto \frac{\Gamma_L}{(\omega - \omega_L)^2 + \Gamma_L^2} + \frac{\Gamma_L}{(\omega + \omega_L)^2 + \Gamma_L^2} + \frac{(D - 1)\Gamma_T}{(\omega - \omega_T)^2 + \Gamma_T^2} + \frac{(D - 1)\Gamma_T}{(\omega + \omega_T)^2 + \Gamma_T^2}$$

N.P. Kryuchkov, et al., Scientific Reports 9, 10483 (2019).

S.A. Khrapak, et al., The Journal of Chemical Physics 149, 134114 (2018).

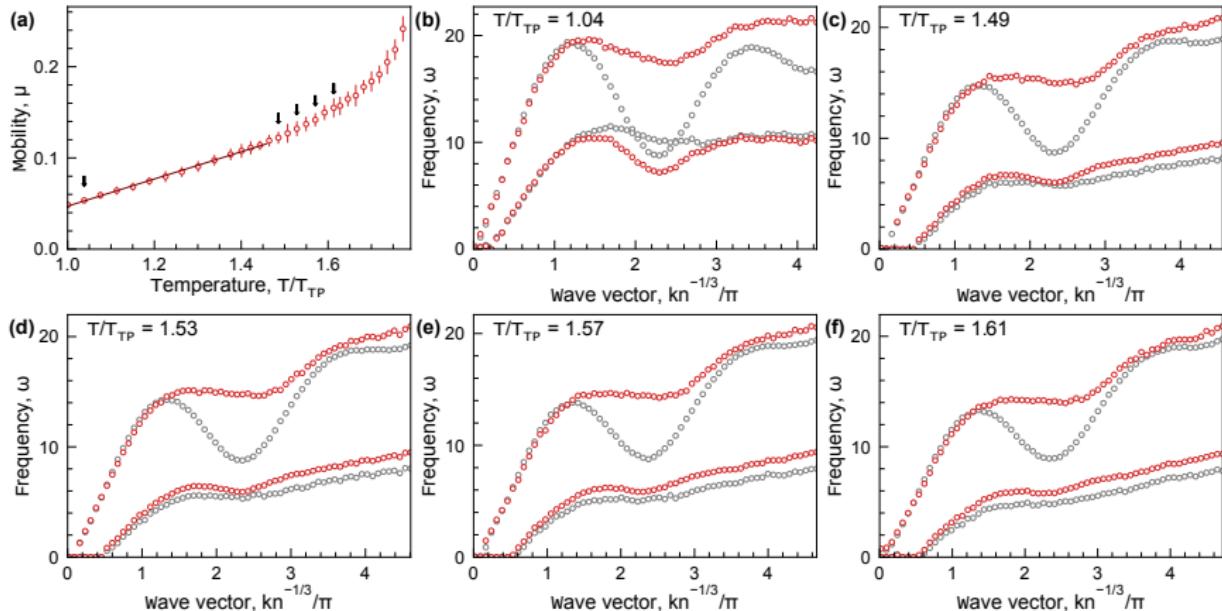
# Результаты вычисления фазовых диаграмм и подвижности



(а) Фазовые диаграммы рассматриваемых потенциалов: фазовые диаграммы рассчитаные плоским слоем.

(б) Температурная зависимость подвижности частиц: подвижность частиц рассчитанная на бинодали жидкость – газ.

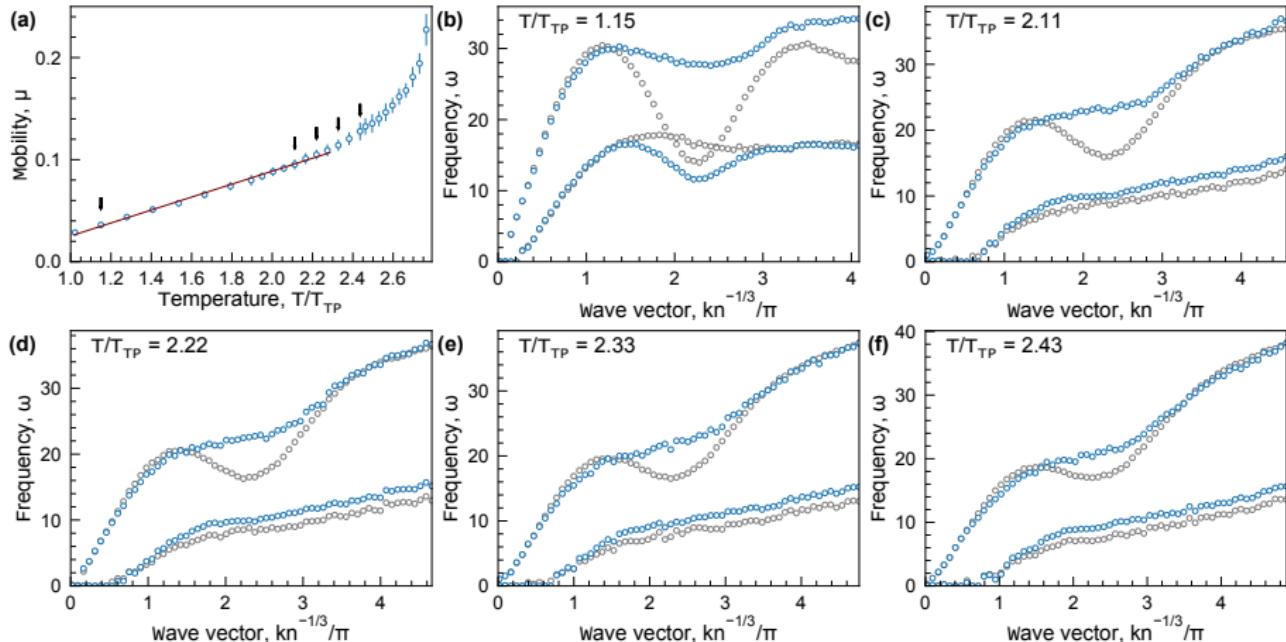
# Результаты совместного анализа



(а) Температурная зависимость подвижности потенциала LJ12-6: точки, в который были рассчитаны спектры указаны черными стрелками.

(б) - (ф) Спектры потенциала LJ12-6: Красным цветом показаны спектры, рассчитанные совместным анализом мод.

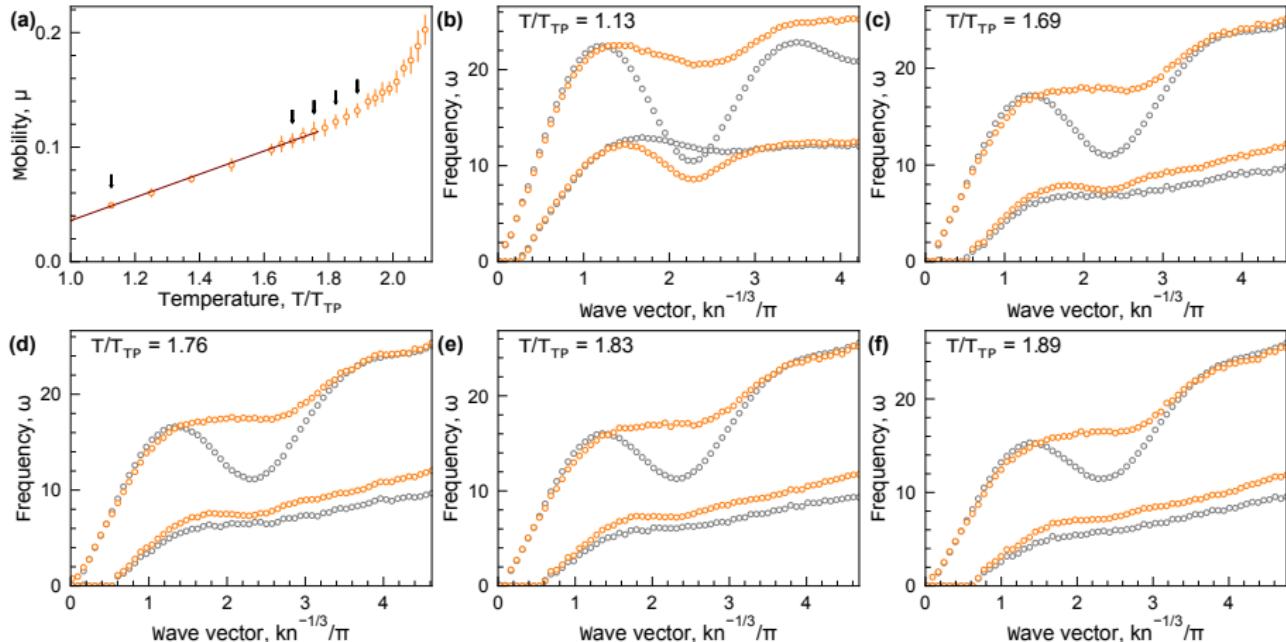
# Результаты совместного анализа



Аналогичные графики для потенциала LJ12-4

Influence of Long-Range Potential Action on Mobility on a Liquid Binodal / Nikita A. Dmitryuk, Lucia A. Mistryukova, Nikita P. Kryuchkov, Sergey A. Khrapak, Stanislav O. Yurchenko. // The Journal of Chemical Physics

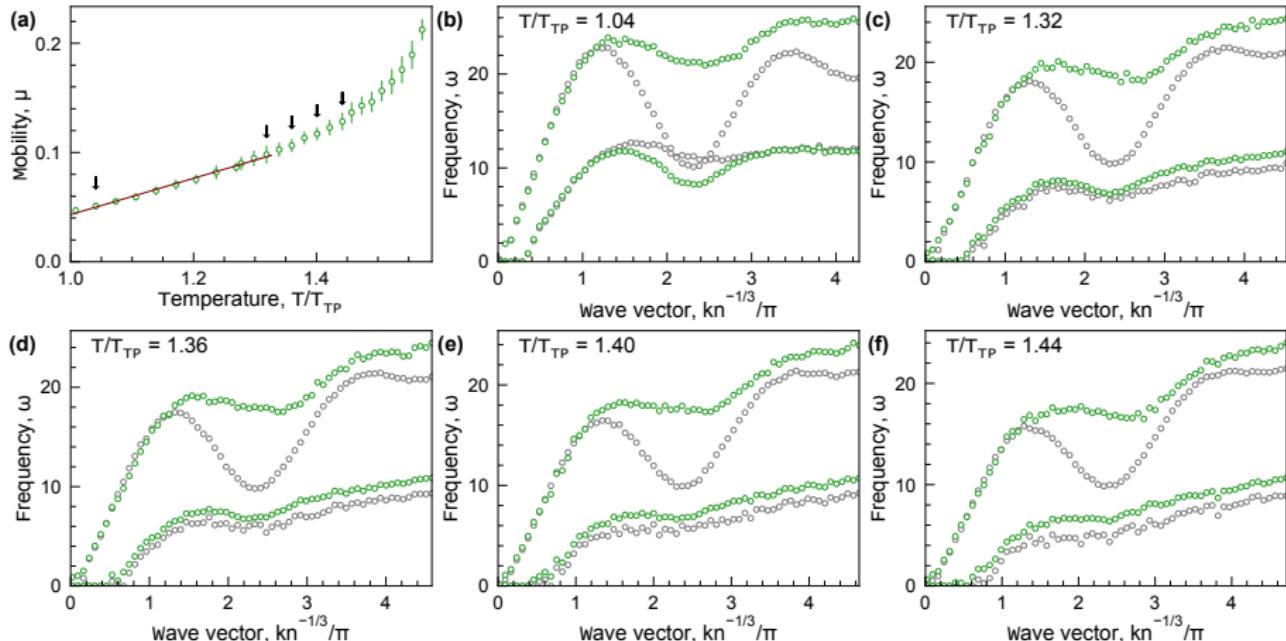
# Результаты совместного анализа



Аналогичные графики для потенциала LJ12-5

Influence of Long-Range Potential Action on Mobility on a Liquid Binodal / Nikita A. Dmitryuk, Lucia A. Mistryukova, Nikita P. Kryuchkov, Sergey A. Khrapak, Stanislav O. Yurchenko. // The Journal of Chemical Physics

# Результаты совместного анализа



Аналогичные графики для потенциала LJ16-6

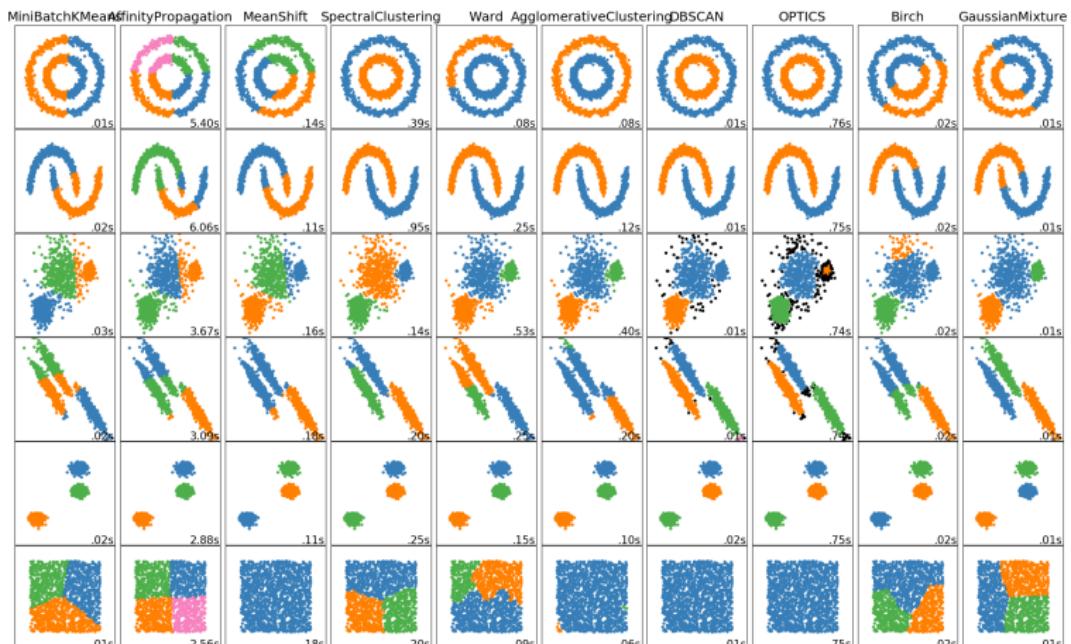
Influence of Long-Range Potential Action on Mobility on a Liquid Binodal / Nikita A. Dmitryuk, Lucia A. Mistryukova, Nikita P. Kryuchkov, Sergey A. Khrapak, Stanislav O. Yurchenko. // The Journal of Chemical Physics

## Выводы главы

- Обнаружено, что подвижность имеет линейную зависимость в широком диапазоне температур на конденсированной бинодали.
- Установлено, что при увеличении дальнодействия потенциала увеличивается отношение температур критической к тройной точки. Кроме того, при этом уменьшается наклон температурной зависимости подвижности.
- Продемонстрировано, что отклонение подвижности от линейной зависимости при высоких температурах коррелирует с переходом спектров возбуждений от осцилирующего к монотонному виду.
- Исследование подвижности на бинодали жидкость-газ для систем с различным дальнодействием притяжением поддержано грантом Российского научного фонда № 20-12-00356. Материалы данной работы готовятся к публикации «Influence of Long-Range Potential Action on Mobility on a Liquid Binodal / Nikita A. Dmitryuk, Lucia A. Mistryukova, Nikita P. Kryuchkov, Sergey A. Khrapak, Stanislav O. Yurchenko. // *The Journal of Chemical Physics*».

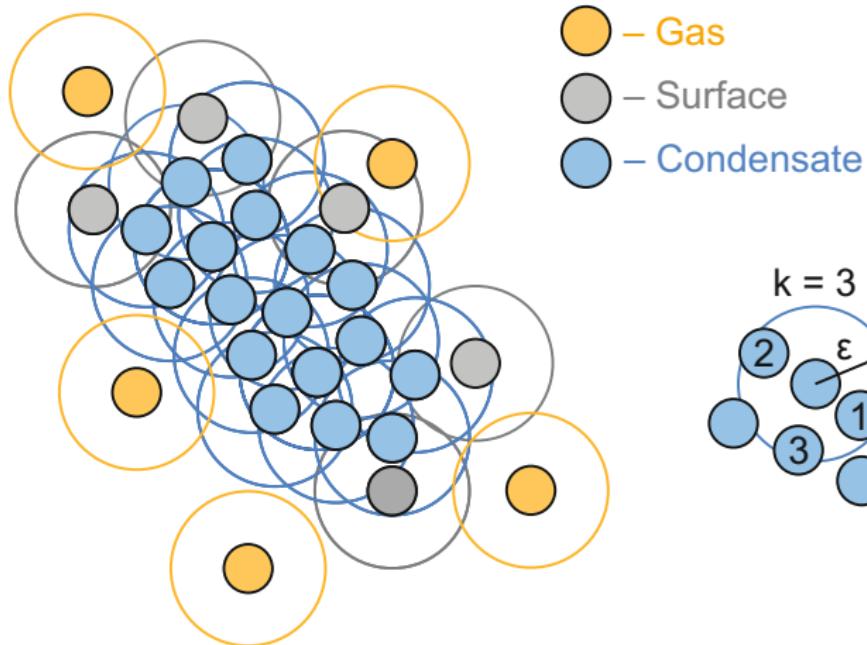
# «ВЛИЯНИЕ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ ПРИТЯЖЕНИЯ НА ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ И СКОРОСТЬ НУКЛЕАЦИИ»

# Алгоритмы кластеризации



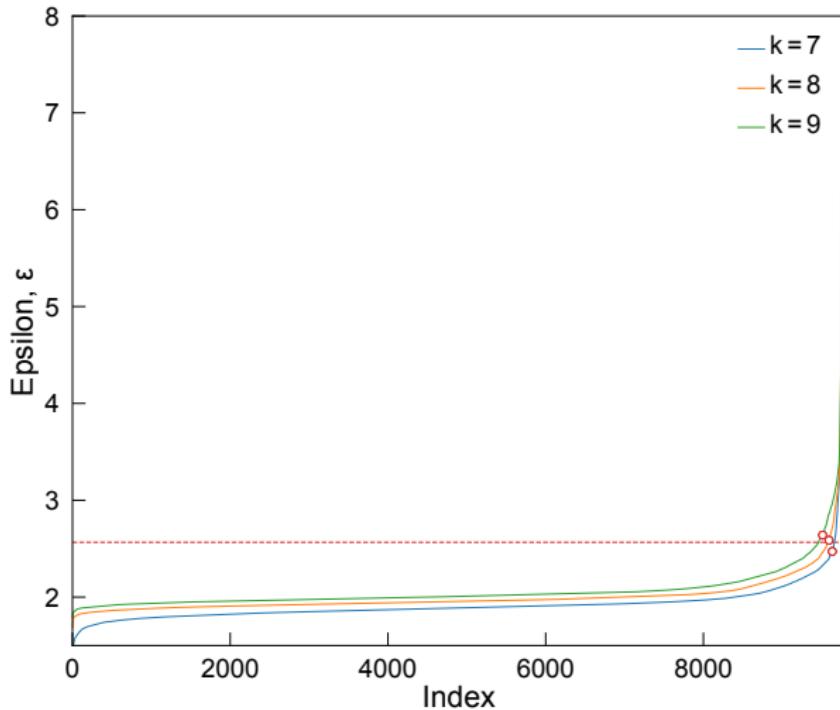
Алгоритм DBSCAN применяется для кластеризации данных в которых присутствует большое количество шумов и кластеры имеют одинаковую плотность.

# Принцип работы DBSCAN



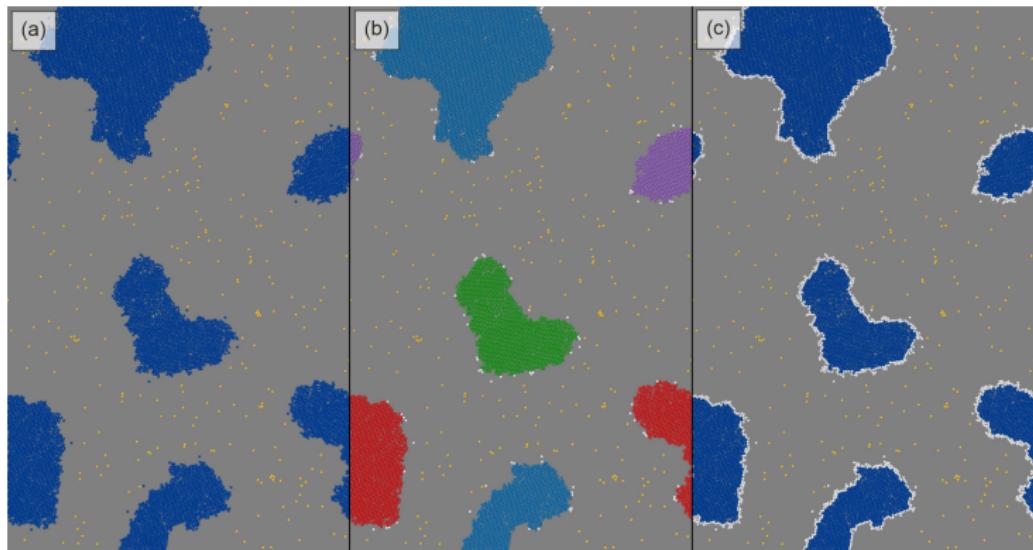
Принцип работы алгоритма кластеризации DBSCAN для случая  $k = 3$ .

## Оптимальный выбор параметра $\varepsilon$



Выбор оптимального параметра  $\varepsilon$ . Красным цветом указаны точки для различных значений параметра  $k$ , наиболее удаленные от линии, соединяющей начало и конец кривой расстояний.

# Пример распознавания частиц в 2D системе LJ12-6.

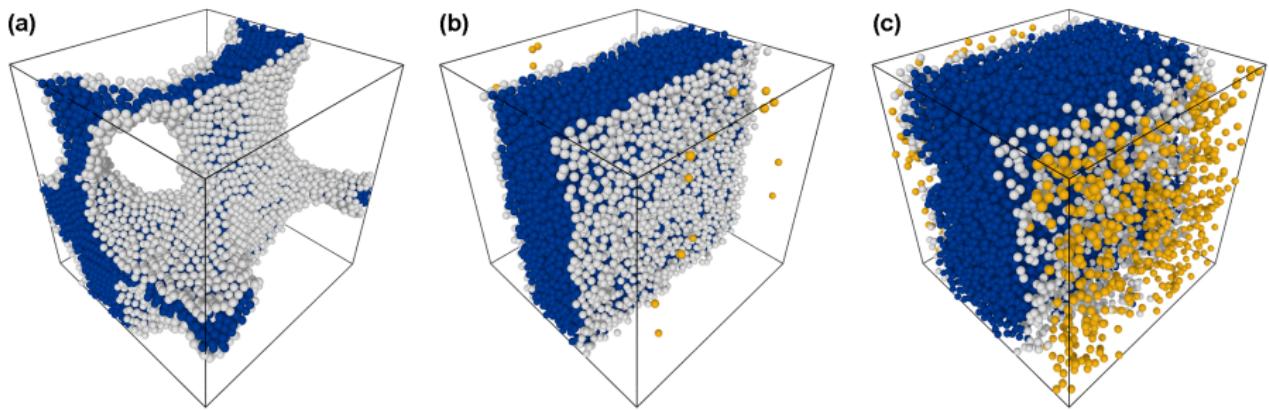


- (а) классификация частиц на конденсат и газ.
- (б) выделение частиц поверхности, по условию принадлежности к конденсату и не к основным частицам.
- (с) пример выделения регулярной поверхности, охватывающей все частицы кластера.

# Распознавание фаз методом DBSCAN в 3D системе LJ12-6

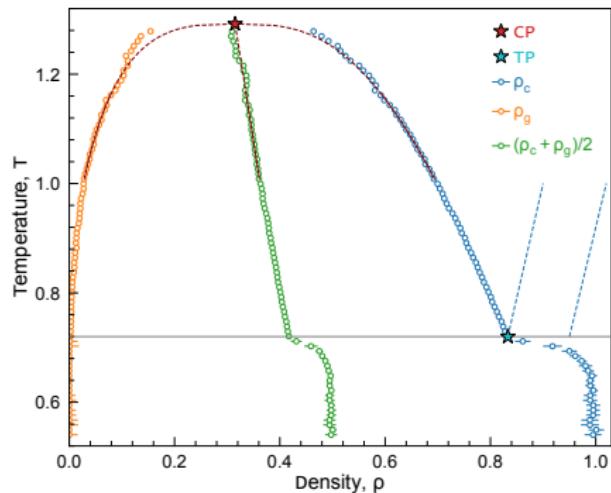


# Распознавание фаз методом DBSCAN в 3D системе LJ12-6



- (а) кластер произвольной формы при температуре ниже тройной точки.
- (б) система в состоянии жидкость + газ.
- (с) система вблизи критической точки.

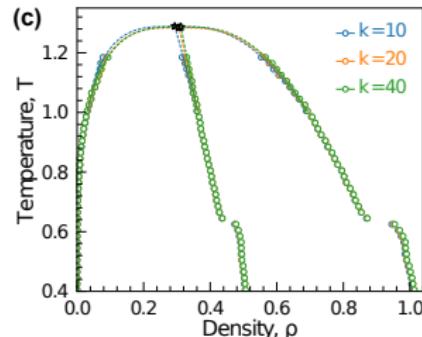
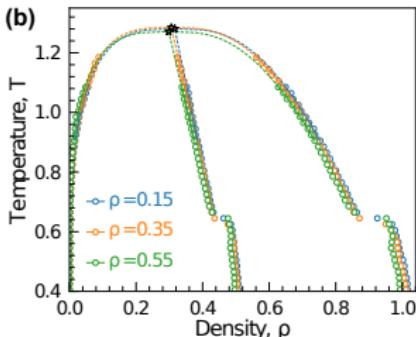
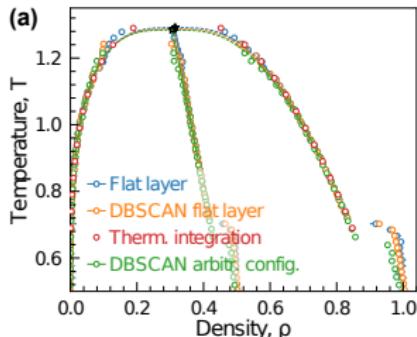
# Построение фазовых диаграмм



$$\rho_c - \rho_g \simeq A\tau^\beta, \quad \rho_c + \rho_g \simeq a\tau + 2\rho_{CP},$$

где  $\tau = T_{CP} - T$ ,  $T_{CP}$  и  $\rho_{CP}$  – температура и плотность в критической точке соответственно,  $\beta$  – критический индекс, и  $A$  и  $a$  являются параметрами, которые должны быть получены из аппроксимации.

# Тесты на устойчивость метода



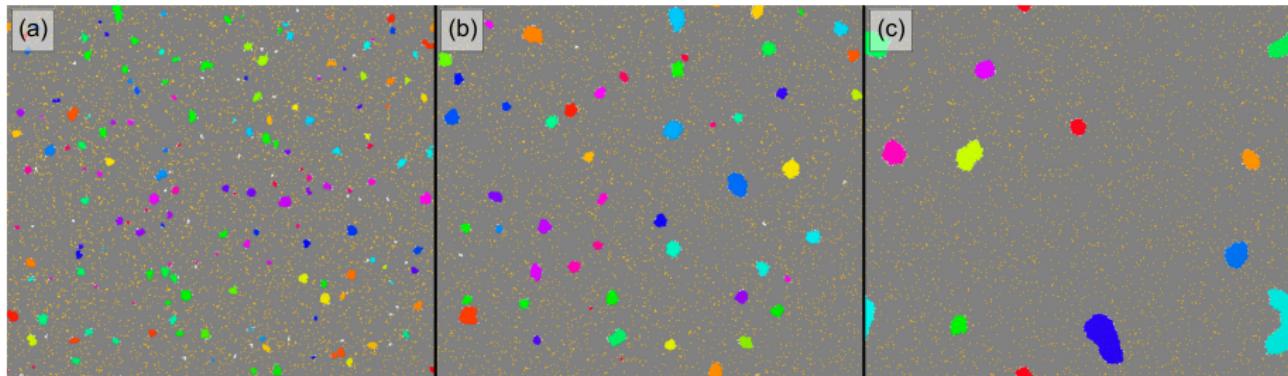
(a) Сравнение различных методов построения фазовых диаграмм. Красным отмечен самый точный метод - термодинамическое интегрирование.

(b) Тест на влияние средней плотности на фазовую диаграмму системы LJ12-6 в трехмерии.

(c) Тест на влияние начального параметра  $k$  на фазовую диаграмму системы LJ12-6 в трехмерии.

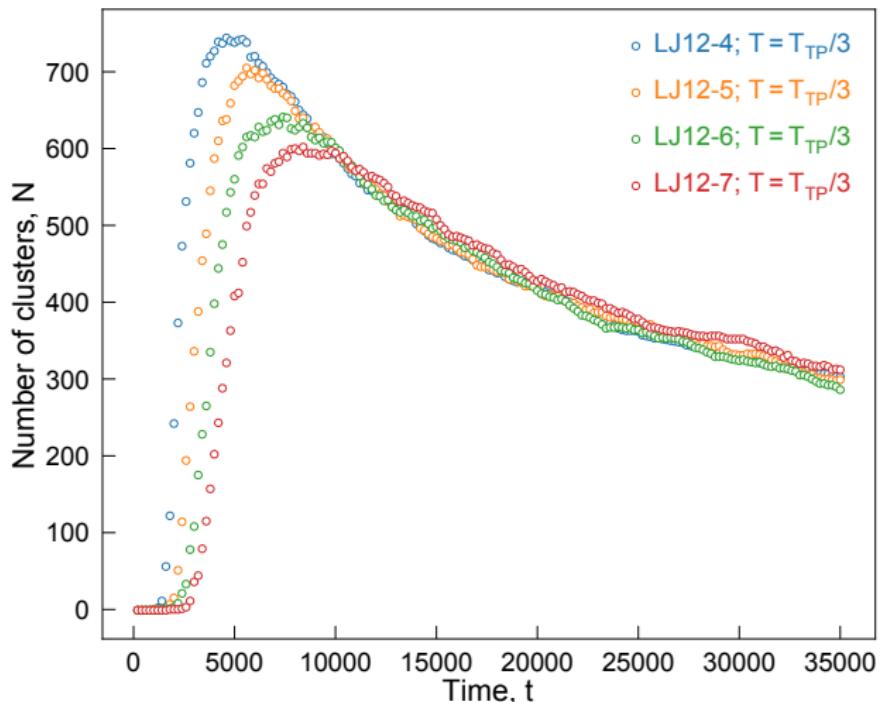
# Скорость нуклеации в переохлажденных системах

$$U_{nm}(r) = \frac{\varepsilon}{n-m} \left( \frac{m}{r^n} - \frac{n}{r^m} \right)$$



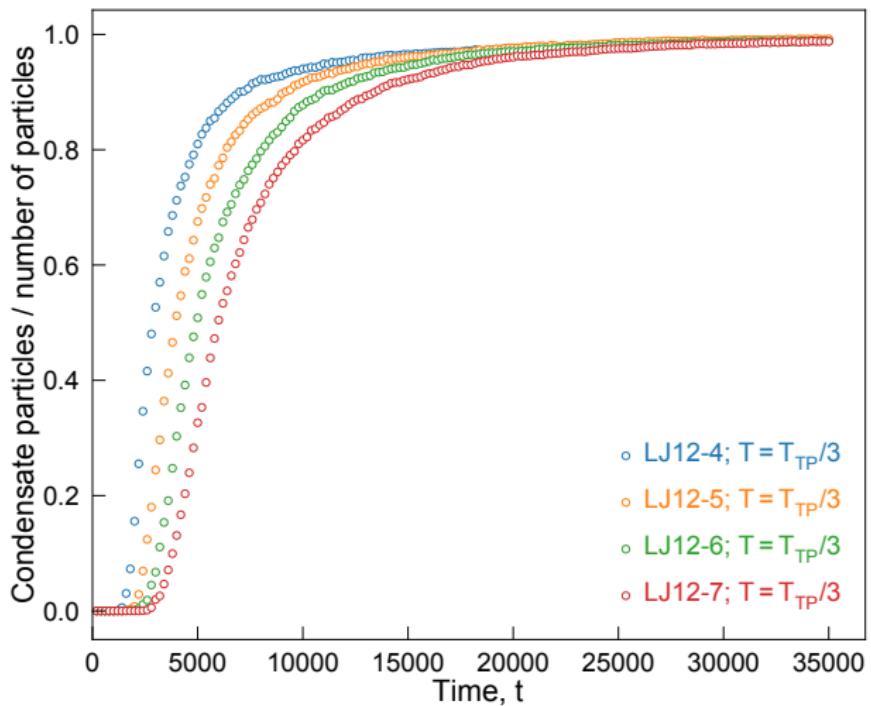
Процесс зарождения и роста кластеров в переохлажденной системе частиц взаимодействующих посредством потенциала Леннарда-Джонса.

# Скорость нуклеации в переохлажденных системах



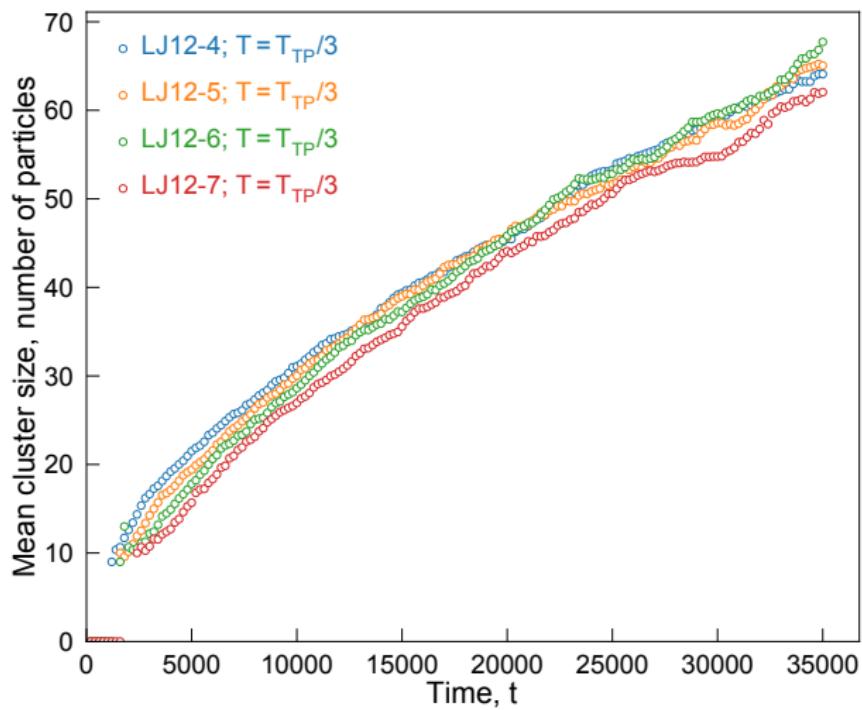
Зависимость количества кластеров от времени.

# Скорость нуклеации в переохлажденных системах



Зависимость доли частиц, находящихся в конденсированном состоянии от времени для различных потенциалов.

# Скорость нуклеации в переохлажденных системах



Зависимость среднего размера кластера от времени для систем с различным дальнодействием потенциала.

## Выводы главы

- Разработан новый метод классификации частиц в двухфазных системах на основе алгоритма кластеризации DBSCAN.
- Проведены тесты на устойчивость нового метода классификации и построения фазовых диаграмм к входным параметрам алгоритма. Метод показывает лучшую точность и больший диапазон применения чем другие методы.
- Установлено, что в переохлажденных системах дальнодействие потенциала взаимодействия оказывает большое влияние на скорость роста кристалла в начале нуклеации, но имеет слабое влияние на последующую эволюцию системы.

## Выводы работы

- Установлено влияние дальнодействия притяжения на транспортные свойства веществ, а также их связь со спектрами возбуждений на бинодали жидкость-газ. Изучено, каким образом дальнодействие потенциала влияет на положение тройных и критических точек.
- Разработан новый метод классификации частиц в двухфазных системах на основе алгоритма кластеризации DBSCAN. Проведены его тексты на устойчивость к входным параметрам в 2D и 3D системах. Алгоритм показывает высокую точность и надежность распознавания фаз.
- С помощью нового метода распознавания фаз был изучен процесс кристаллообразования в переохлажденных системах и установлено влияние дальнодействия притяжения на скорость нуклеации.

# Публикации

За период магистратуры были опубликованы следующие работы:

- Kryuchkov, N. P., Dmitryuk, N. A., Li, W., Ovcharov, P. V., Han, Y., Sapelkin, A. V., and Yurchenko, S. O. (2021). Mean-field model of melting in superheated crystals based on a single experimentally measurable order parameter. *Scientific reports*, 11(1), 1-15.
- Yakovlev, E. V., Kryuchkov, N. P., Korsakova, S. A., Dmitryuk, N. A., Ovcharov, P. V., Andronic, M. M., ... and Yurchenko, S. O. (2022). 2D colloids in rotating electric fields: A laboratory of strong tunable three-body interactions. *Journal of Colloid and Interface Science*, 608, 564-574.
- Tsiok, E. N., Fomin, Y. D., Gaiduk, E. A., Tareyeva, E. E., Ryzhov, V. N., Libet, P. A., ... Yurchenko, S. O. (2022). The role of attraction in the phase diagrams and melting scenarios of generalized 2D Lennard-Jones systems. *The Journal of Chemical Physics*, 156(11), 114703.

# Конференции

Результаты работ представлены на следующих конференциях:

- XX Школа-конференция молодых ученых «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений», Сочи, 16-26 сентября 2021г.
- Современные тенденции развития функциональных материалов, Сочи, 11-14 ноября 2021г.
- Dynamic phenomena workshop 2022.

Ваши вопросы!