

Исследование плавления и затвердевания малых кластеров

Отчет по первому этапу проекта

Лихтенштейн Алина Алексеевна

19 марта 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Информация

- Лихтенштейн Алина Алексеевна
- Студент группы НФИбд-02-22
- Российский университет дружбы народов
- 1132229533@pfur.ru

Вводная часть

- Наноразмерные системы обладают уникальными свойствами, отличными от макроскопических тел
- Исследование фазовых переходов в малых кластерах важно для развития нанотехнологий
- Понимание зависимости свойств от размера частиц помогает создавать материалы с заданными характеристиками
- Компьютерное моделирование позволяет изучать процессы, трудно наблюдаемые экспериментально

- **Объект исследования:** малые кластеры с “магическими” числами частиц (7, 19, 37)
- **Предмет исследования:** процессы плавления и затвердевания в наноразмерных системах
- **Научная новизна:** выявление специфических эффектов фазовых переходов в зависимости от размера кластера
- **Практическая значимость:** применение результатов в разработке наноматериалов и наноустройств

Цель: исследовать особенности плавления и затвердевания малых кластеров с “магическими” числами частиц.

Задачи: - Изучить теоретические основы метода молекулярной динамики - Рассмотреть особенности фазовых переходов в малых кластерах - Разработать физическую модель для исследования плавления и затвердевания - Определить необходимые параметры и алгоритмы для дальнейшего моделирования

- Метод молекулярной динамики для моделирования движения частиц
- Потенциал Леннард-Джонса для описания взаимодействия между частицами
- Алгоритм Верле для численного интегрирования уравнений движения
- Термодинамические характеристики:
 - Температура
 - Флуктуации длины связи
 - Теплоемкость
 - Парная корреляционная функция

Теоретические основы

В отличие от макроскопических систем, в малых кластерах:

- Температура плавления зависит от размера кластера
- Переход от твердого состояния к жидкому происходит в интервале температур
- Возможно оболочечное плавление (внешние слои плавятся раньше внутренних)
- Наблюдается квазиплавление (кластер проводит часть времени в твердом, часть в жидком состоянии)

“Магические” числа и их значение

- “Магические” числа частиц соответствуют особо стабильным конфигурациям
- Для гексагональной структуры определяются формулой: $N = 1 + 3n(n + 1)$
- Первые несколько “магических” чисел: 1, 7, 19, 37, 61
- У кластеров с “магическими” числами максимальна средняя энергия связи

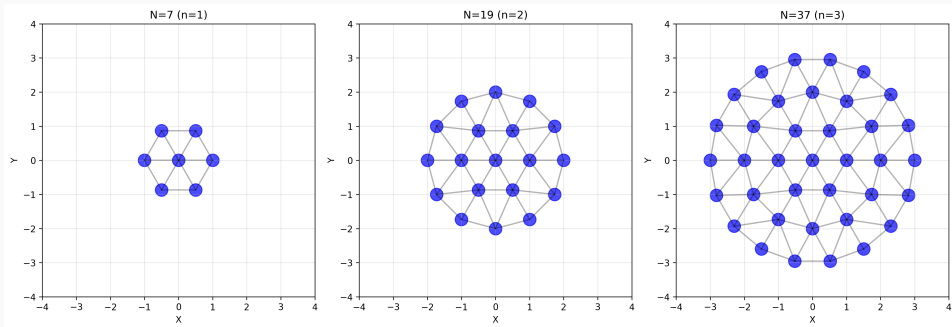


Рис. 1: Структура гексагональных кластеров

- При уменьшении числа частиц снижается температура плавления T_c
- Это связано с увеличением доли поверхностных атомов, пропорциональной $N^{-1/3}$
- Поверхностные атомы имеют более высокую потенциальную энергию
- Экспериментально показано, что снижение T_c может достигать сотен градусов

Зависимость температуры плавления от размера

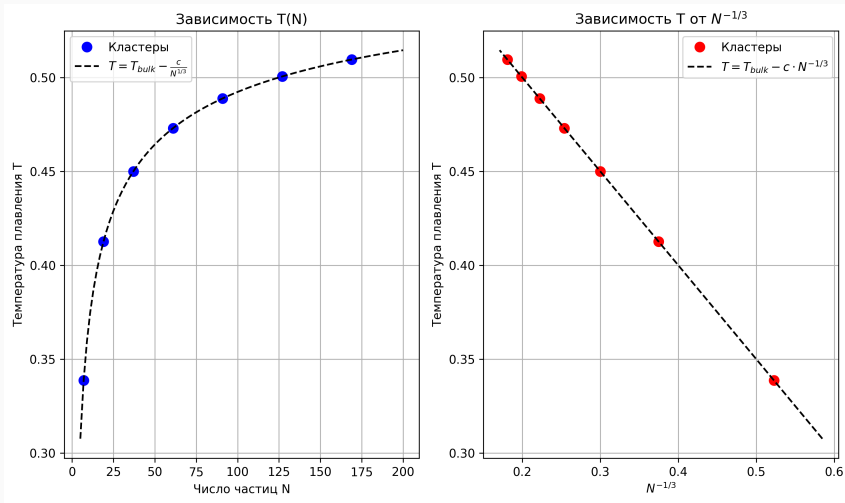


Рис. 2: Зависимость температуры плавления от размера кластера

Описание модели

Для моделирования взаимодействия используется потенциал Леннард-Джонса:

$$U(r) = \varepsilon[(b/r)^{12} - 2(b/r)^6]$$

где: - ε — глубина потенциальной ямы - b — равновесное расстояние между частицами - r — расстояние между частицами

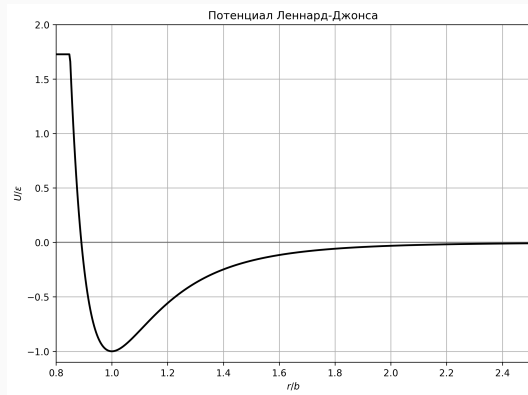


Рис. 3: Потенциал Леннард-Джонса

Для интегрирования уравнений движения применяется алгоритм Верле в скоростной форме:

$$r_i^{n+1/2} = r_i^n + v_i^n \cdot \Delta t/2$$

$$r_i^{n+1} = r_i^n + v_i^{n+1/2} \cdot \Delta t$$

$$v_i^{n+1} = v_i^{n+1/2} + a_i^{n+1} \cdot \Delta t/2$$

Критерий выбора шага: сохранение полной энергии системы с точностью около 0.5%.

1. Создание кластера с “магическим” числом частиц при низкой температуре
2. Постепенный нагрев системы (масштабирование скоростей)
3. Уравновешивание системы после каждого шага нагрева
4. Усреднение термодинамических характеристик
5. Охлаждение системы для выявления гистерезиса
6. Анализ зависимости температуры плавления от размера кластера

Ожидаемые результаты

Определение фазового перехода через:

- **Флуктуации длины связи:** резкое увеличение при плавлении
- **Теплоемкость:** пик соответствует фазовому переходу
- **Гистерезис** между кривыми нагрева и охлаждения

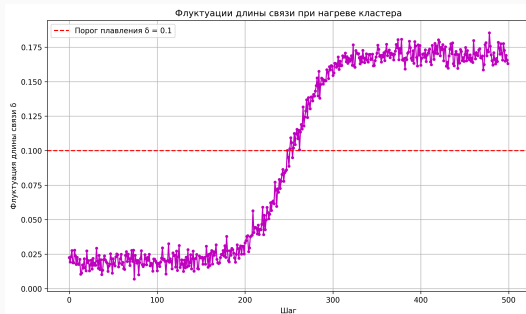


Рис. 4: Флуктуации длины связи при плавлении кластера

- Различие между процессами нагрева и охлаждения указывает на фазовый переход первого рода
- Величина гистерезиса зависит от размера кластера
- Ширина переходной области уменьшается с увеличением размера кластера

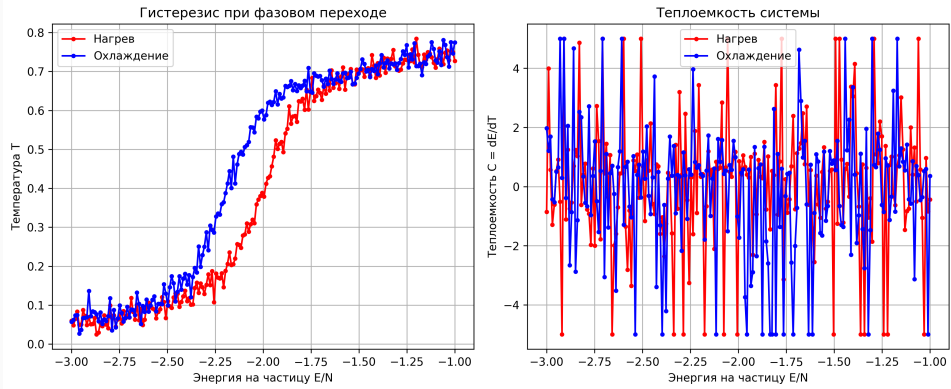


Рис. 5: Кривые нагрева и охлаждения кластера

Заключение

- Рассмотрены теоретические основы метода молекулярной динамики применительно к малым кластерам
- Описаны особенности фазовых переходов в наноразмерных системах
- Предложена физическая модель для исследования плавления и затвердевания
- Определены методы анализа фазового состояния системы

- Программная реализация предложенной модели
- Проведение численных экспериментов для кластеров различных размеров
- Анализ зависимости температуры плавления от размера кластера
- Изучение явления оболочечного плавления и других специфических эффектов