

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ (НАЦИОНАЛЬНЫЙ  
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

**Моделирование процесса роста кристаллических структур в зависимости от  
исходных параметров системы.**

**Выполнили:**

Деревянченко Михаил Б03-106

Герасимов Илья Б03-105

г. Долгопрудный,

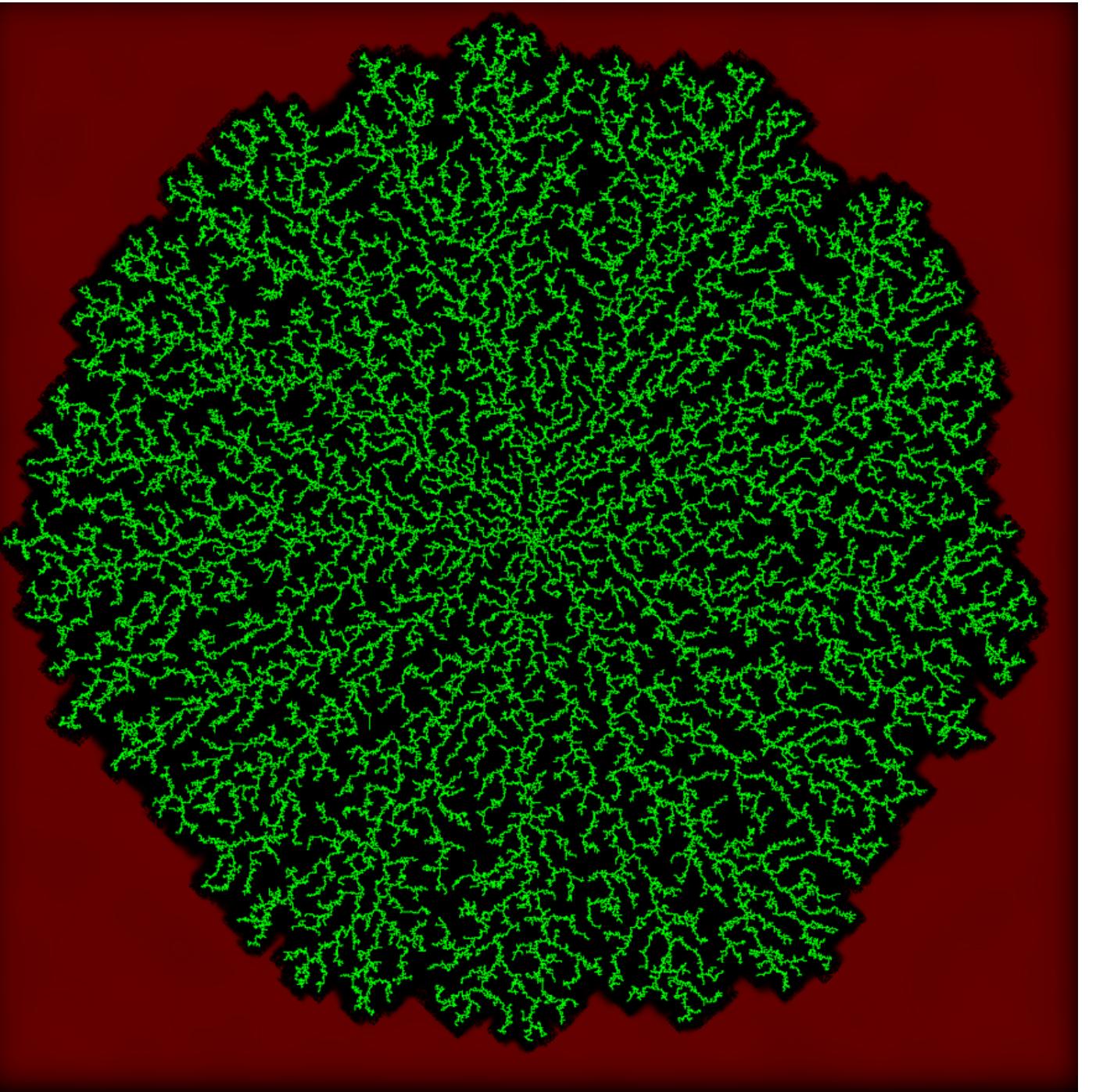
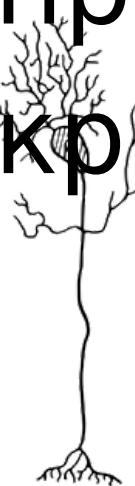
2022

# Содержание

- Аннотация
- Введение
- Кристаллизация
- Описание модели
- Математическая модель
- Результаты
- Вывод

# Аннотация

В данной работе построена макроскопическая имитационная модель роста кристаллов из раствора, основанная на задании параметров физических процессов, проходящих при кристаллизации.



# Введение

Биологическая жидкость является индикатором нарушения обменных процессов при различных патологиях органа зрения. Медиками разрабатывается неинвазивный метод кристаллографического исследования различных биологических жидкостей, в том числе и слезы. В нем исследуются кристаллограммы слезы, которые представляют собой высушеннную при определенной температуре каплю.

Для успешной диагностики заболеваний важно установить соответствие между физическими параметрами раствора биологической жидкости и формой образующихся кристаллов. В данной работе выполняется имитационное моделирование процесса роста кристалла из раствора на основе известных параметров.

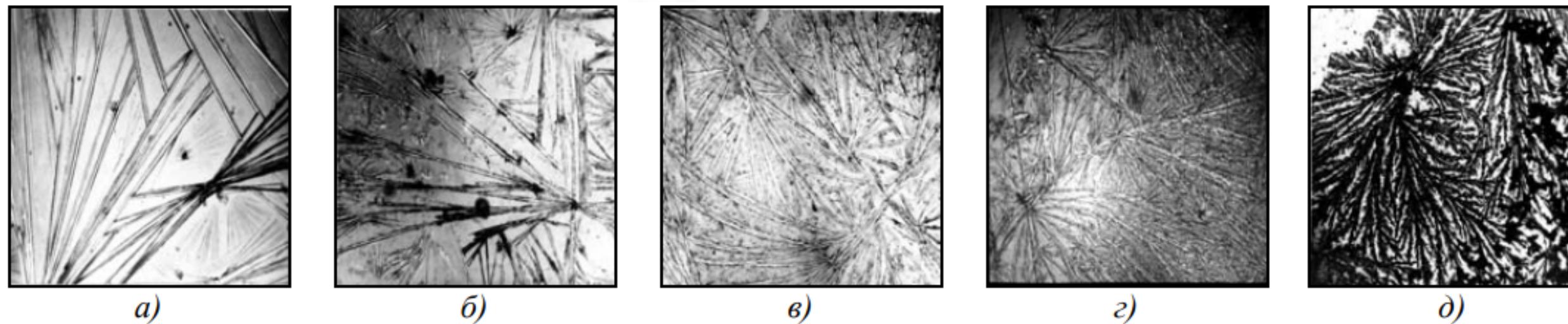
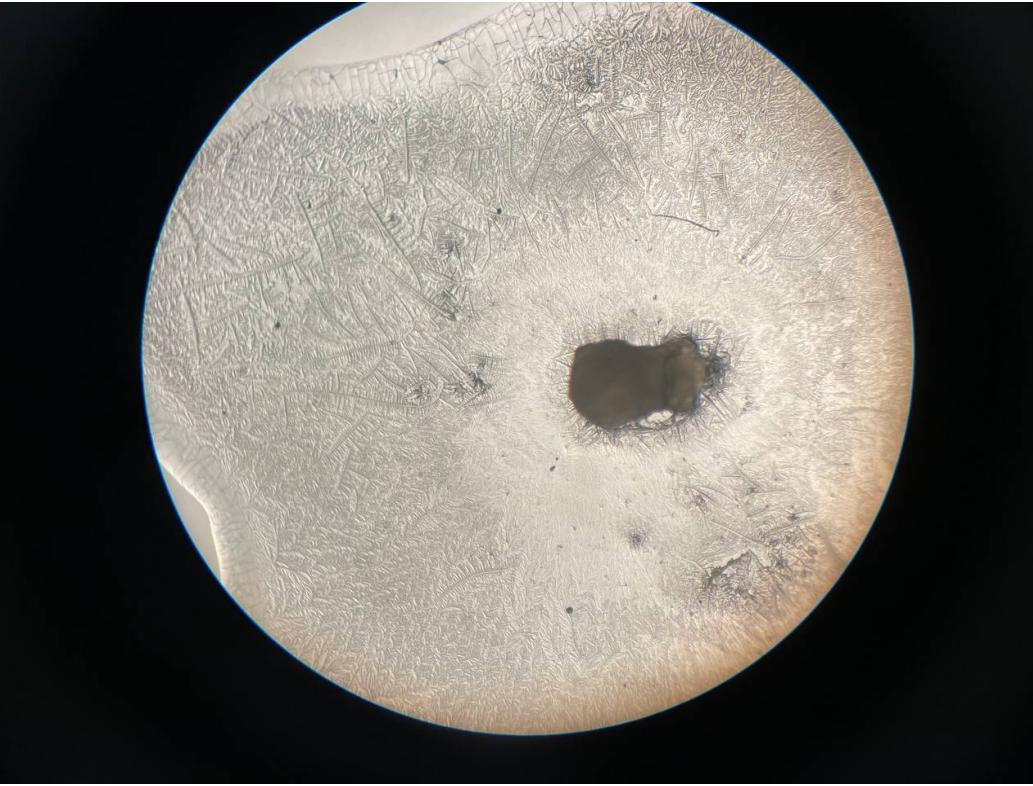
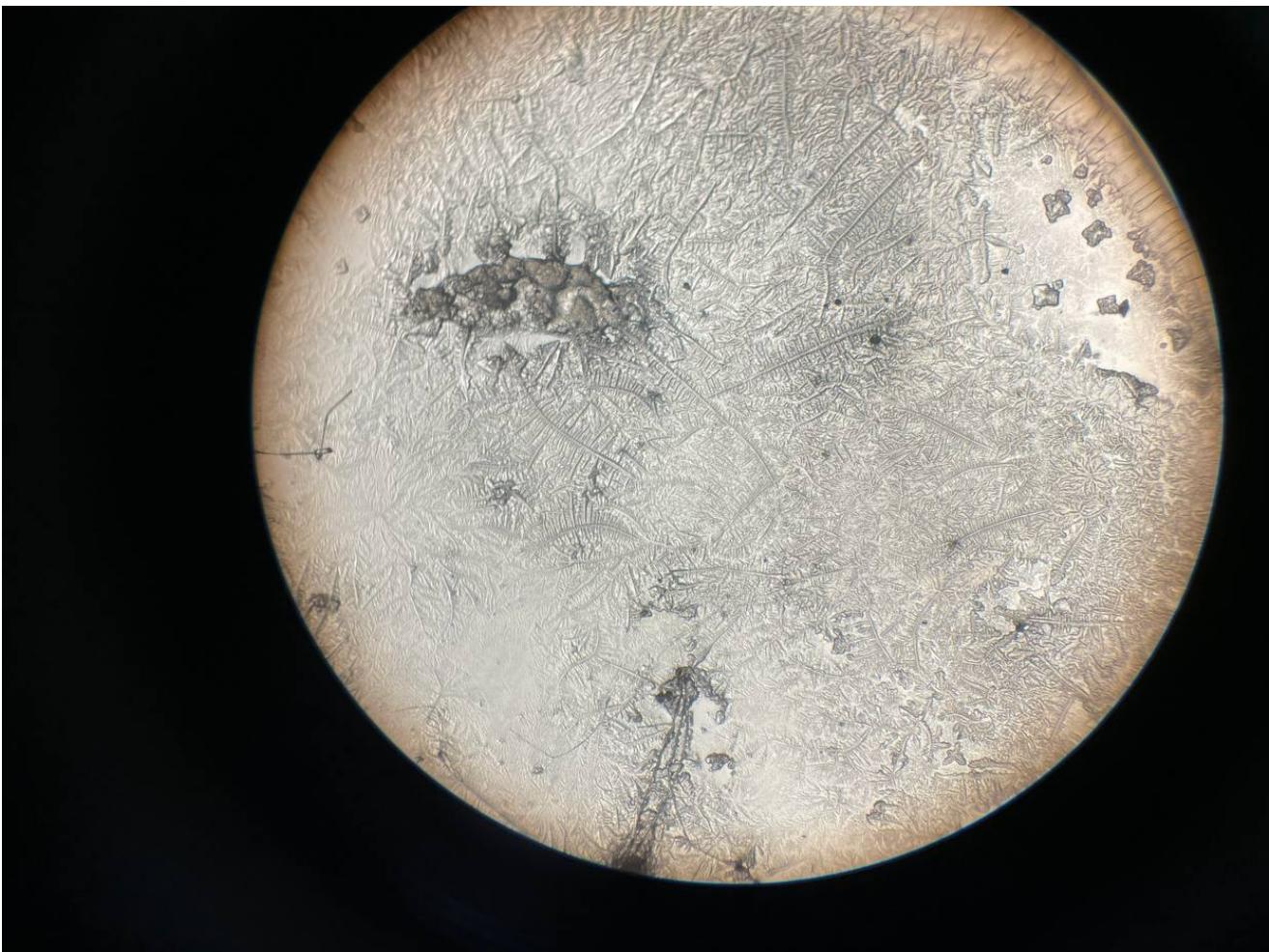


Рис. 1. Примеры классов кристаллограмм:  
а) нормальный, б) дистрофический, в) слабо выраженный воспалительный,  
г) умеренно выраженный воспалительный, д) сильно выраженный воспалительный.

# Изображения высохшей слезы под микроскопом

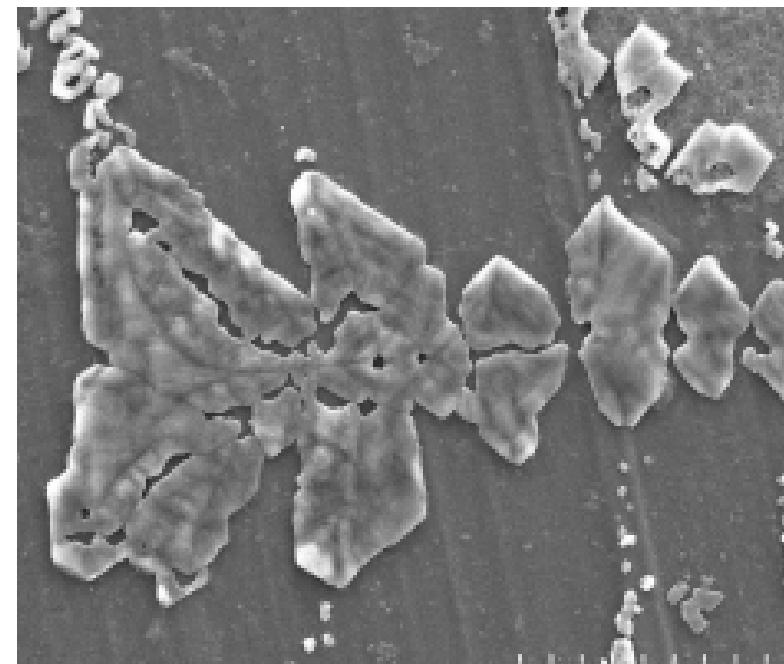


Изображение высохшей капли жидкости для линз под микроскопом, содержащей хлорид натрия



# Кристаллизация

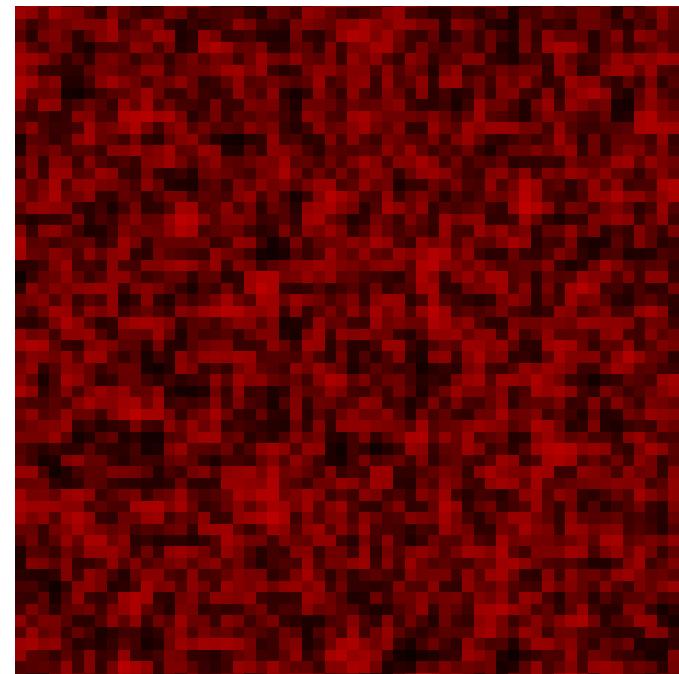
На практике чаще всего в исследуемое вещество добавляют кристаллизующийся раствор и полученную субстанцию искусственно высушивают.



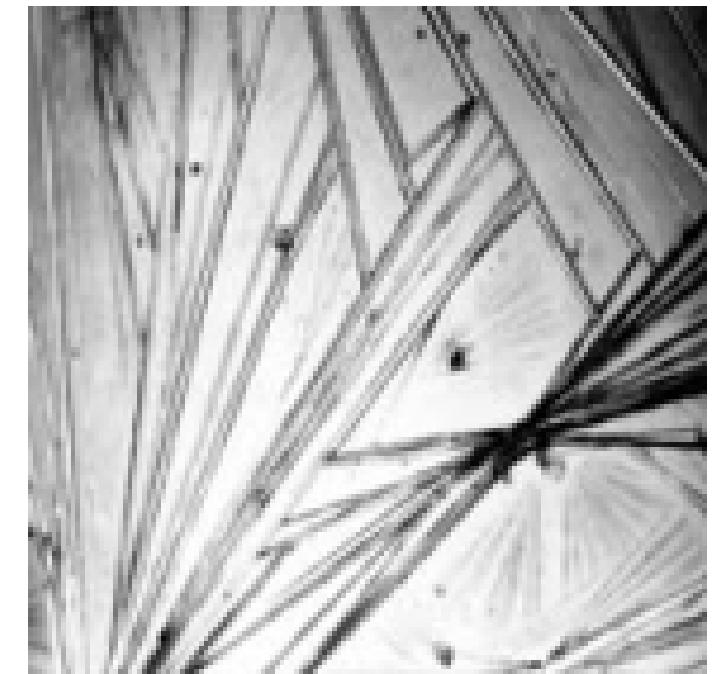
- а. слюна и NaCl,
- б. Моча и CuCl<sub>2</sub>,
- в. глицин с плазмой крови

# Описание модели

В основе модели рассматриваются процессы диффузии и переноса вещества, зависящие от вероятности кристаллизации и растворения. Рассматривается кристаллизация в виде дендритов, так как это наиболее похожая модель на реальную. Все поле разбито на элементарные объемы - ячейки. У каждой ячейки есть кристаллизующееся вещество и примесь. Для каждой ячейки рассчитывается вероятность кристаллизации и скорость ее протекания.



Разбиение  
на ячейки



Действительная  
кристаллограмма

# Математическая модель

Процесс диффузии описывается следующим

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right)$$

уравнением:

C - концентрация,  
D-коэффициент  
диффузии

Для решения выбрана разностная

$$C_{ij}^{k+1} = C_{ij}^k +$$

схема:

$$+ D \frac{h_t}{h_x^2} (C_{i+1,j}^k + C_{i-1,j}^k - 4C_{ij}^k + C_{i,j+1}^k + C_{i,j-1}^k)$$

$$C_{ij}^0 = \varphi_{ij}, \Delta C_{ij}^k = 0, (i, j) \in \Gamma.$$

Схема устойчива  
при следующем  
условии:

$$\frac{h_t}{h_x^2} \leq \frac{1}{4D}.$$

, где в числителе шаг по  
времени,  
а в знаменателе расстояние

Вероятности кристаллизации и растворения элементарного объема соответственно равны:

$$p = 1 - \exp\left(-V \frac{\Delta t}{\Delta x}\right), \quad q = 1 - \exp\left(-W \frac{\Delta t}{\Delta x}\right)$$

, где у экспоненты в числителе тот же шаг по времени, что и в разностной схеме, а в знаменателе расстояние между элементарными объемами

$V$  - скорость роста грани кристалла

$W$  - скорость растворения грани кристалла

Существует точка равновесной  
в которой кристалл в среднем, растет с такой же скоростью  $V$  с которой  
растворяется. Тогда скорость роста и растворения соответственно:

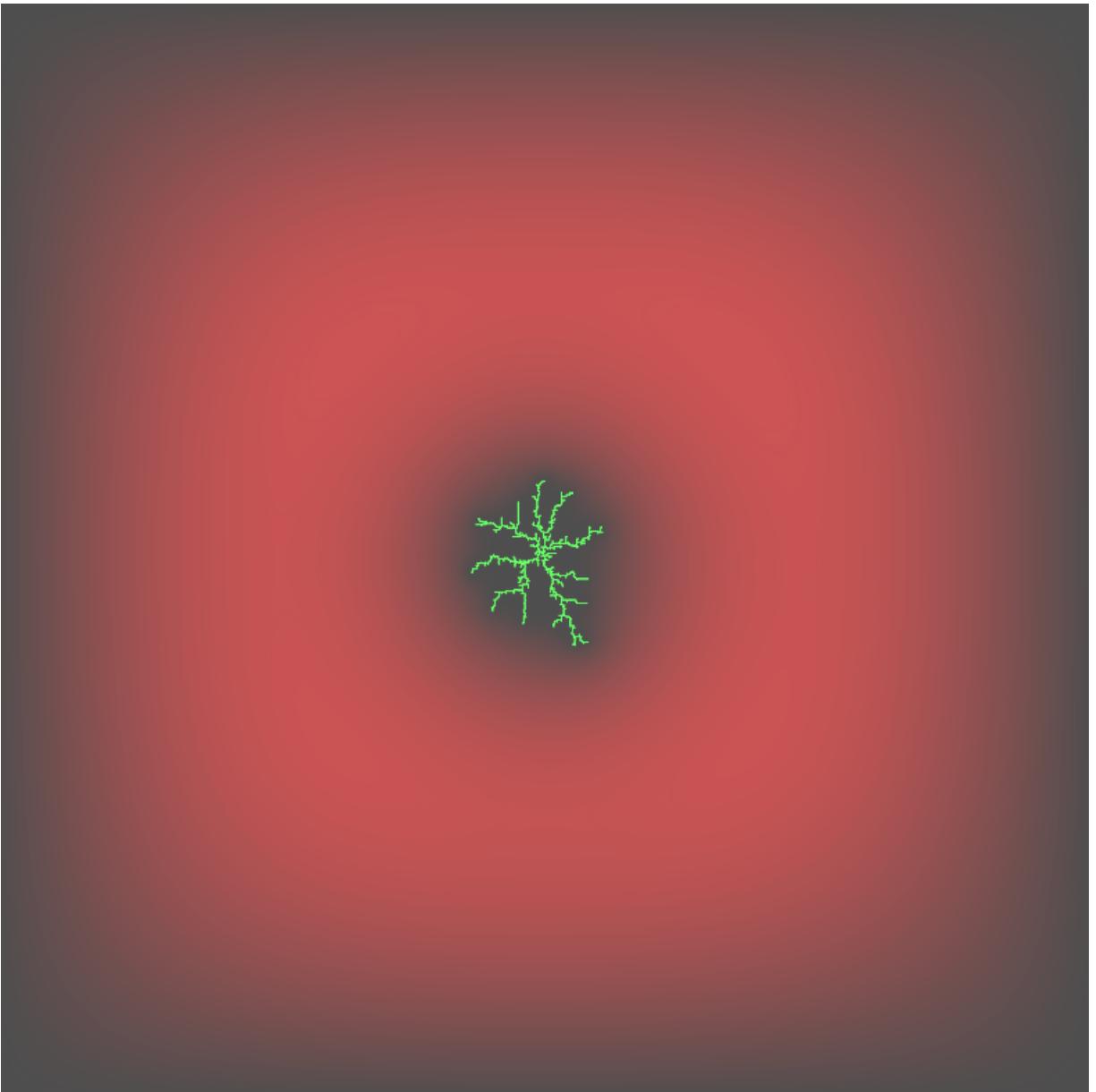
$$V = V_0 \frac{C_a - C_0}{C_0} \left( \frac{\rho_s - C_0}{\rho_a - C_a} \right), \quad W = V_0 \frac{C_0}{C_a} \left( \frac{\rho_s - C_a}{\rho_a - C_0} \right).$$

Пусть кристаллизуется ячейка с концентрацией вещества С. После кристаллизации ее концентрация С' должна стать равной плотности вещества кристалла ρ. То есть в эту ячейку должно дополнительно поступить вещество в количестве Сн = ρ – С из соседних ячеек. Соседние ячейки рассматриваются только группами. В группу относятся все ячейки из раствора, находящиеся на одинаковом расстоянии от кристаллизующейся ячейки. Обозначим через  $S_i$  суммарное количество вещества, находящееся во всех ячейках  $i$ -й группы. Сначала необходимое вещество берется из первых соседей. Если во всех первых соседях не набирается необходимое количество вещества, то рассматриваются вторые, третьи (и так далее) соседи. Пусть выполняются условия  $S_1 + S_2 + \dots + S_i < C_n$  и  $S_1 + S_2 + \dots + S_{i+1} \geq C_n$ . Тогда из ячеек 1-х, 2-х, ...,  $i$ -х соседей забирается все вещество, то есть концентрация в них полагается равной нулю. И из последнего слоя соседей забирается недостающее вещество в количестве  $\sim C = C_n - S_1 - S_2 - \dots - S_i$ . Из каждой ячейки  $(i+1)$ -о слоя соседей количество забираемого вещества пропорционально ее изначальной концентрации:

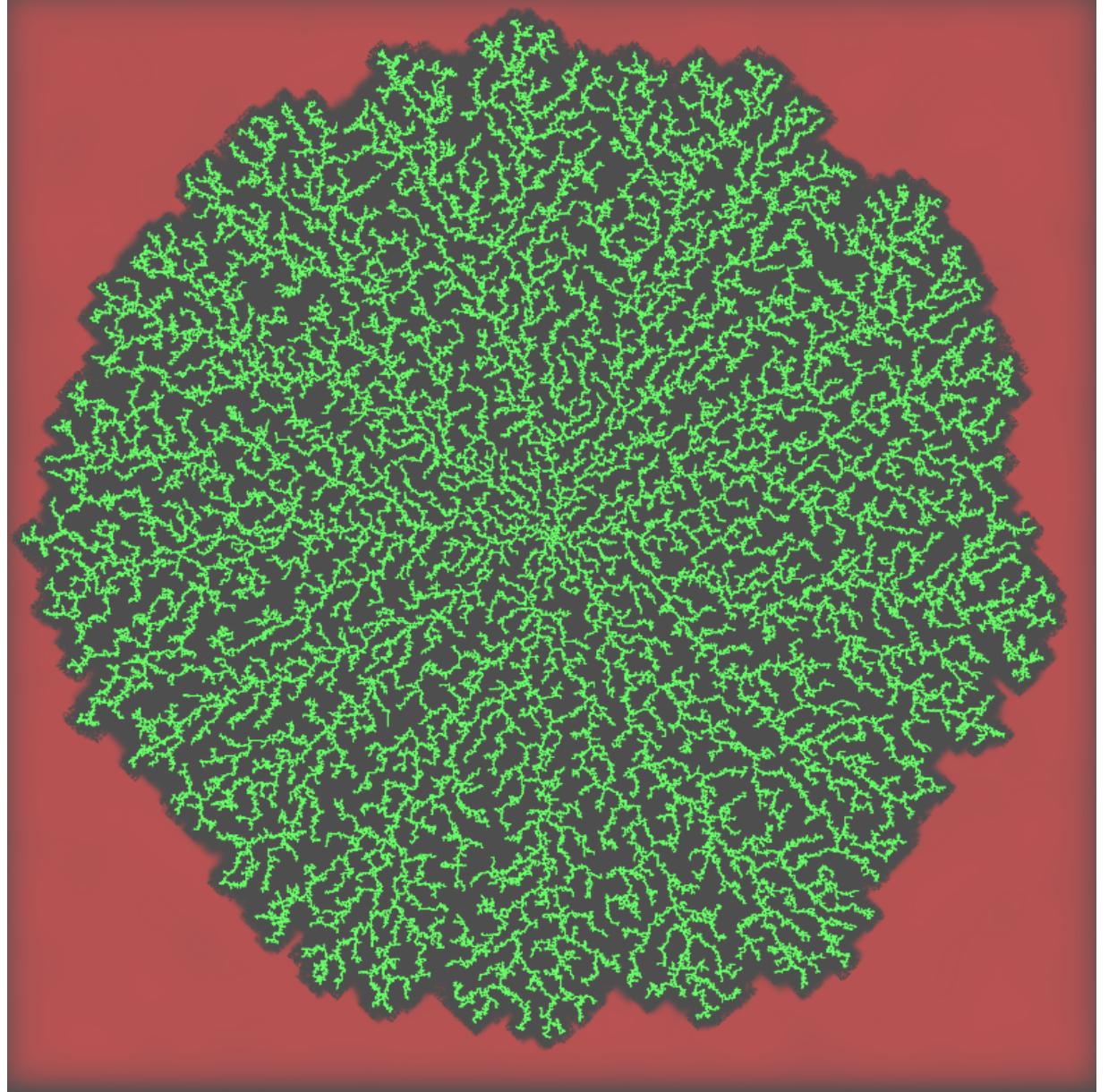
$$C'_j = C_j \frac{C}{C_1 + \dots + C_K}, \quad j = 1, K,$$

При растворение ничего не происходит

# Результаты

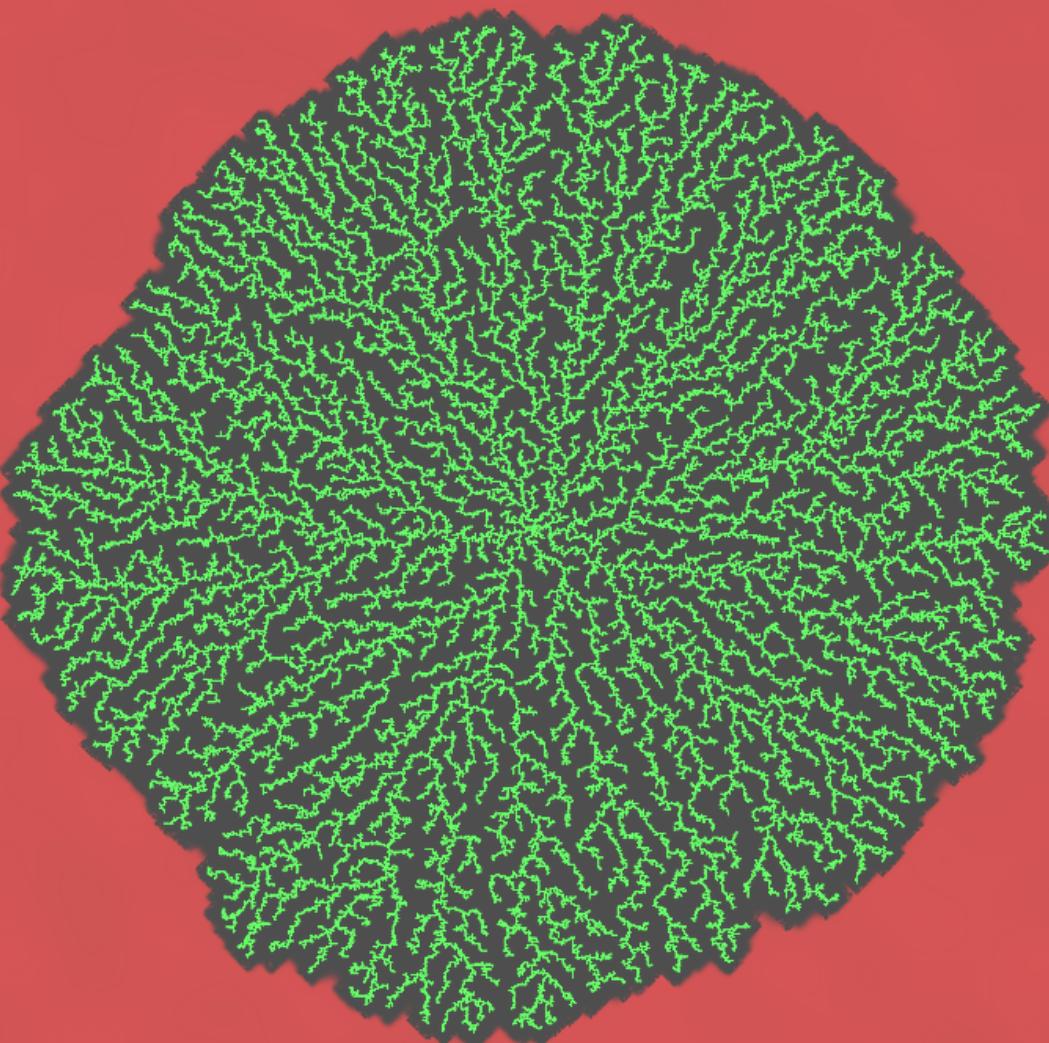


Реальные условия.  
1.5с работы



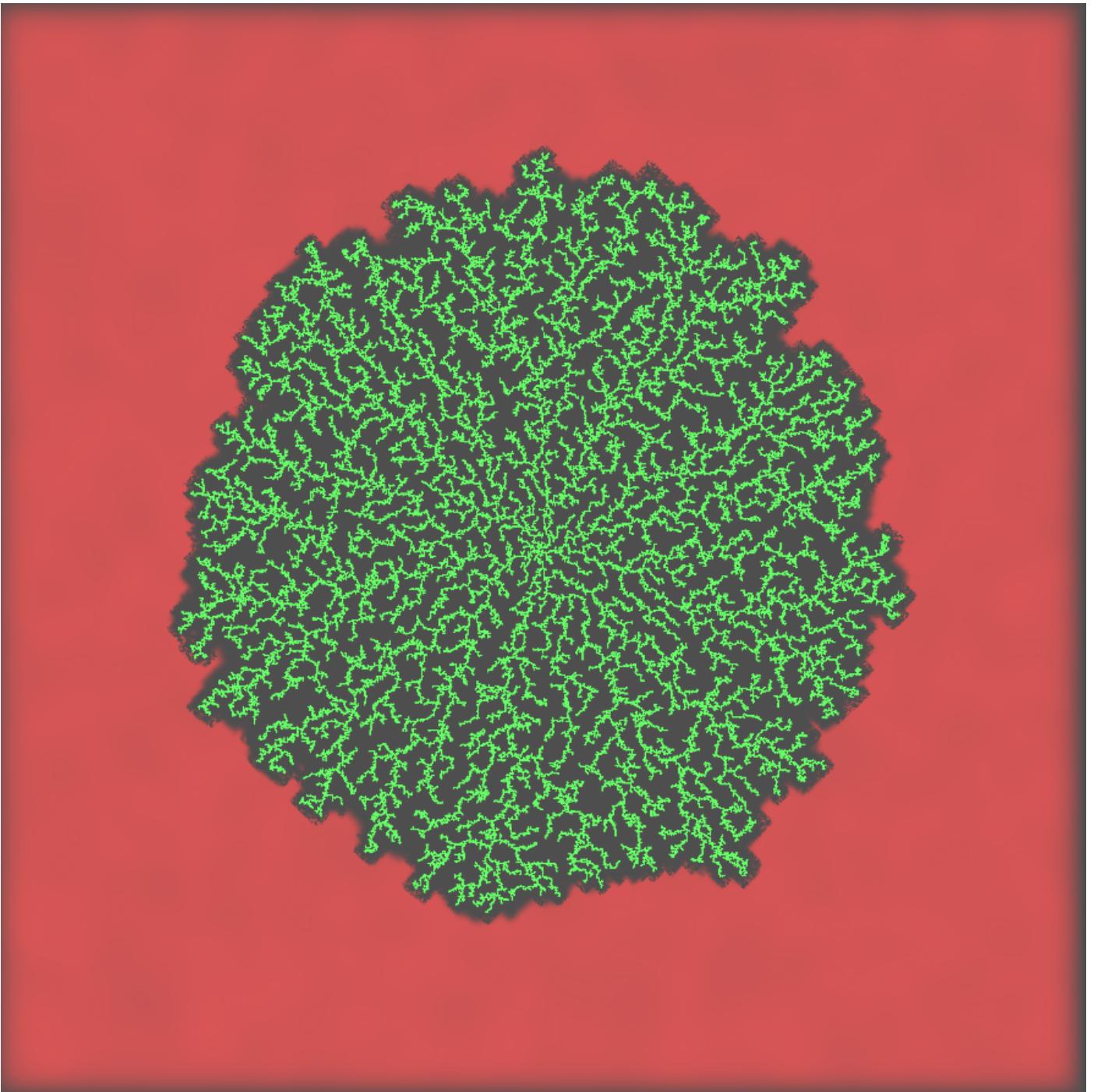
Условно взятые  
стандартные условия

# Изменение равновесной концентрации



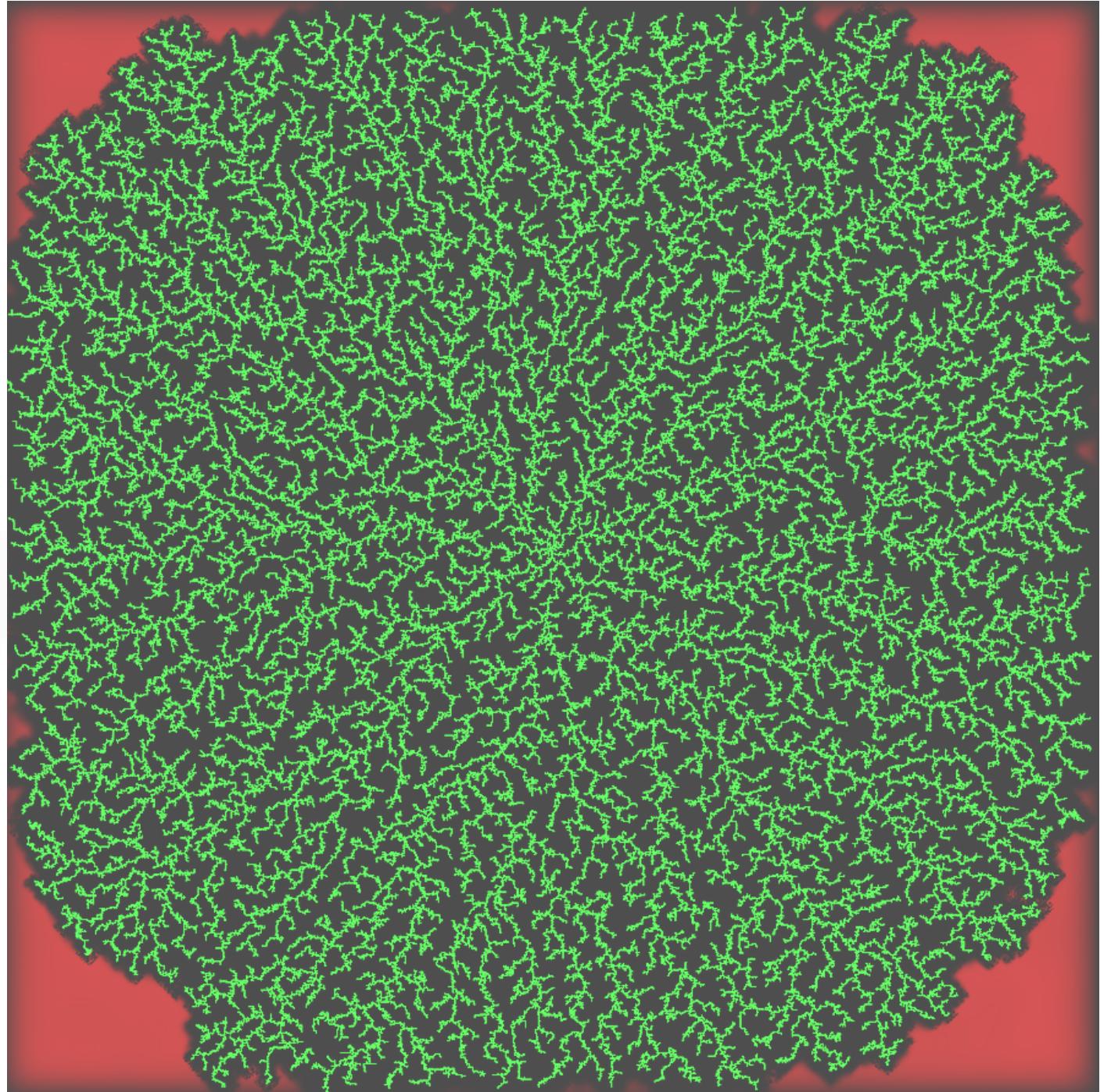
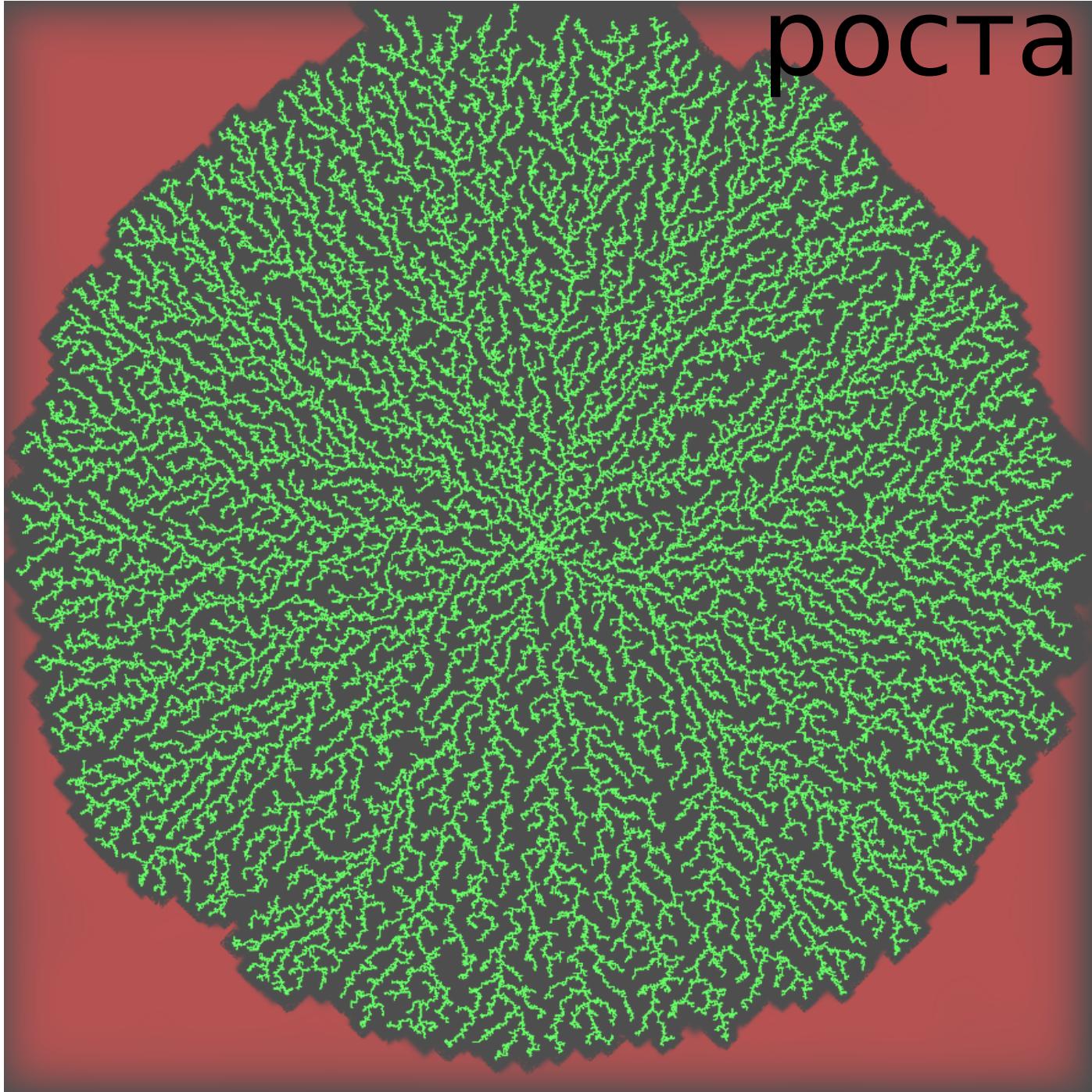
ниже стандартной 0.2s

( $A_S = A/S$  отношение введенного значения и  
стандартного)

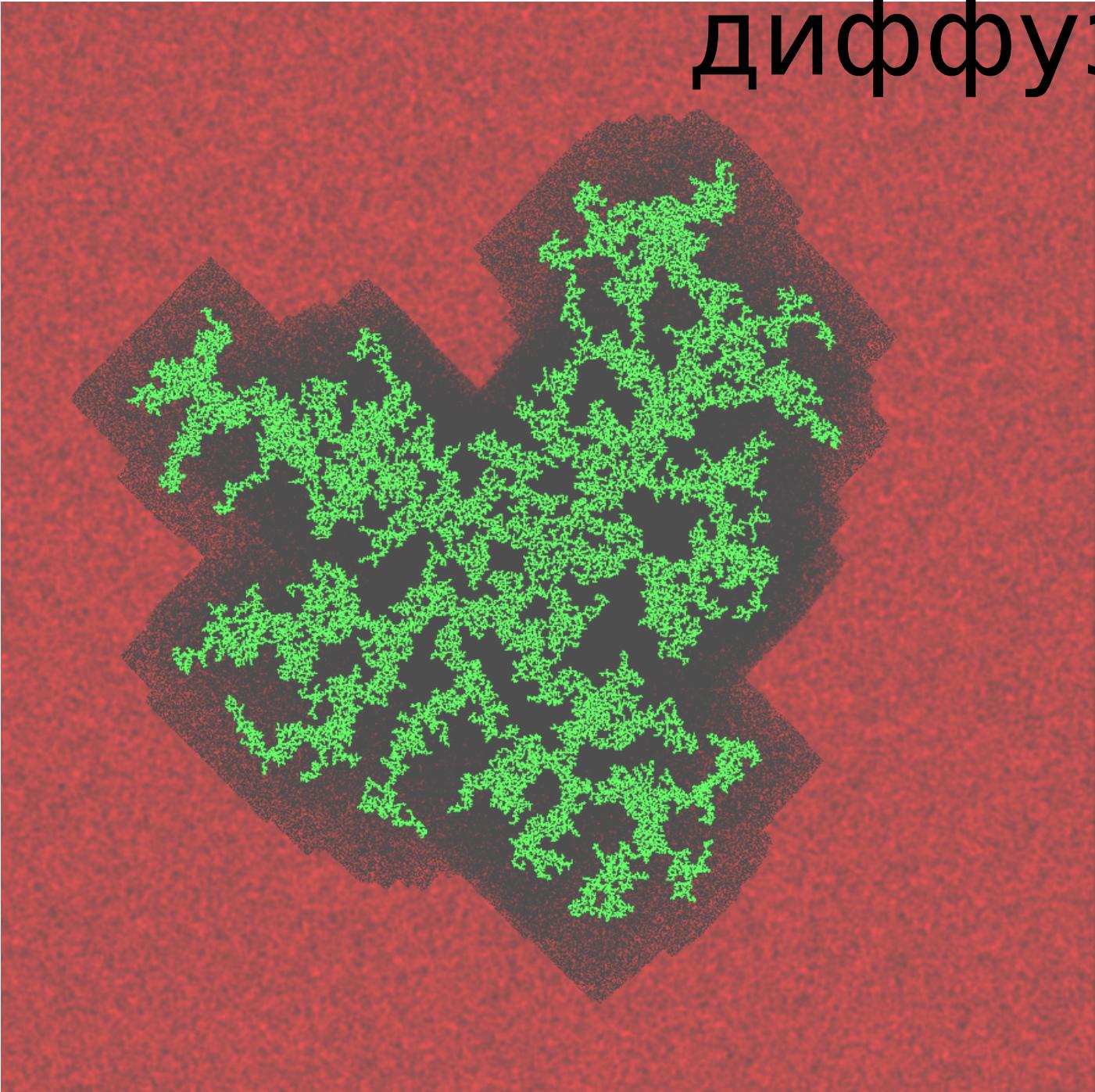


выше стандартной 1.8s

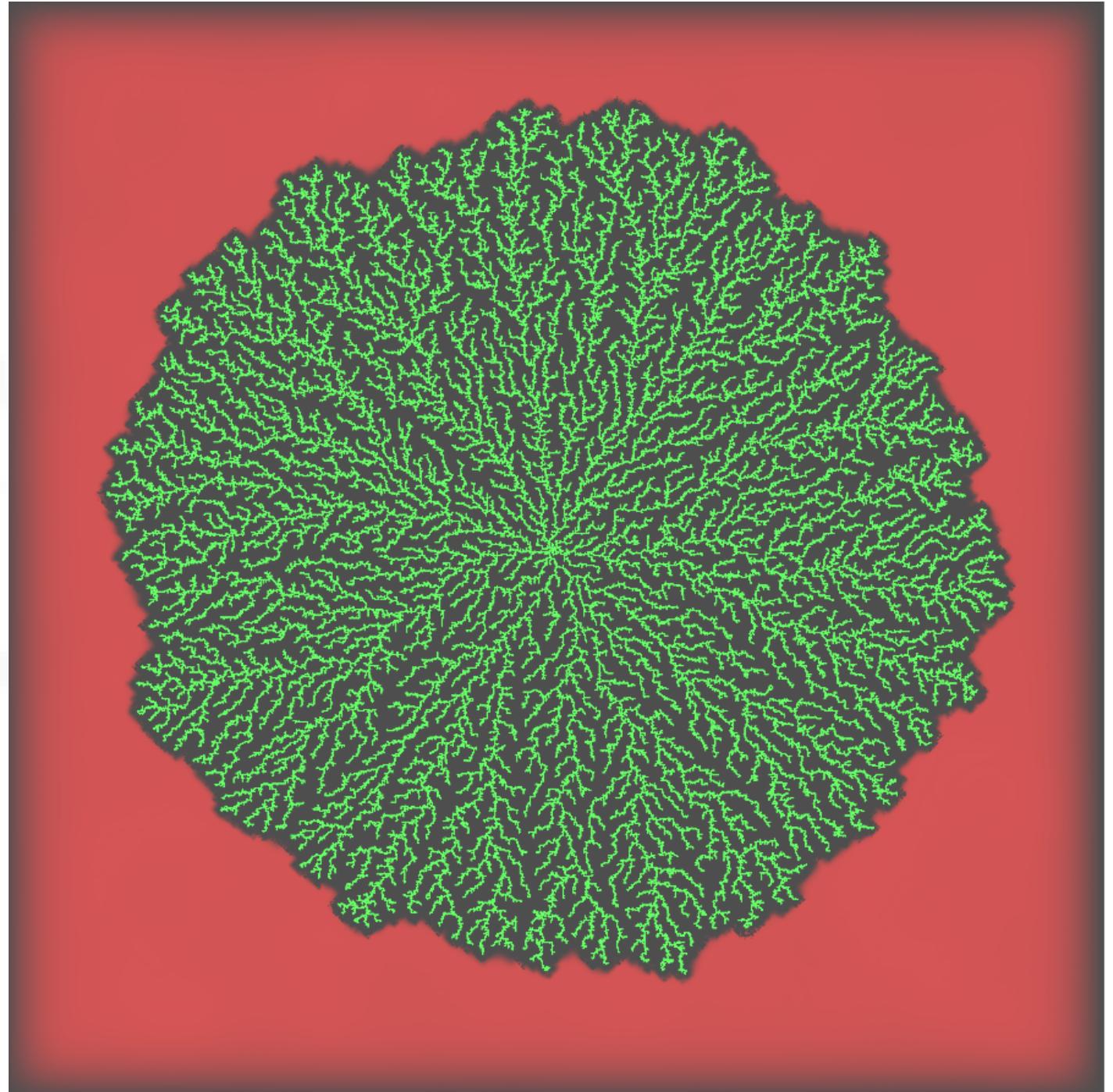
# Изменение базовой скорости



# Изменение коэффициента диффузии

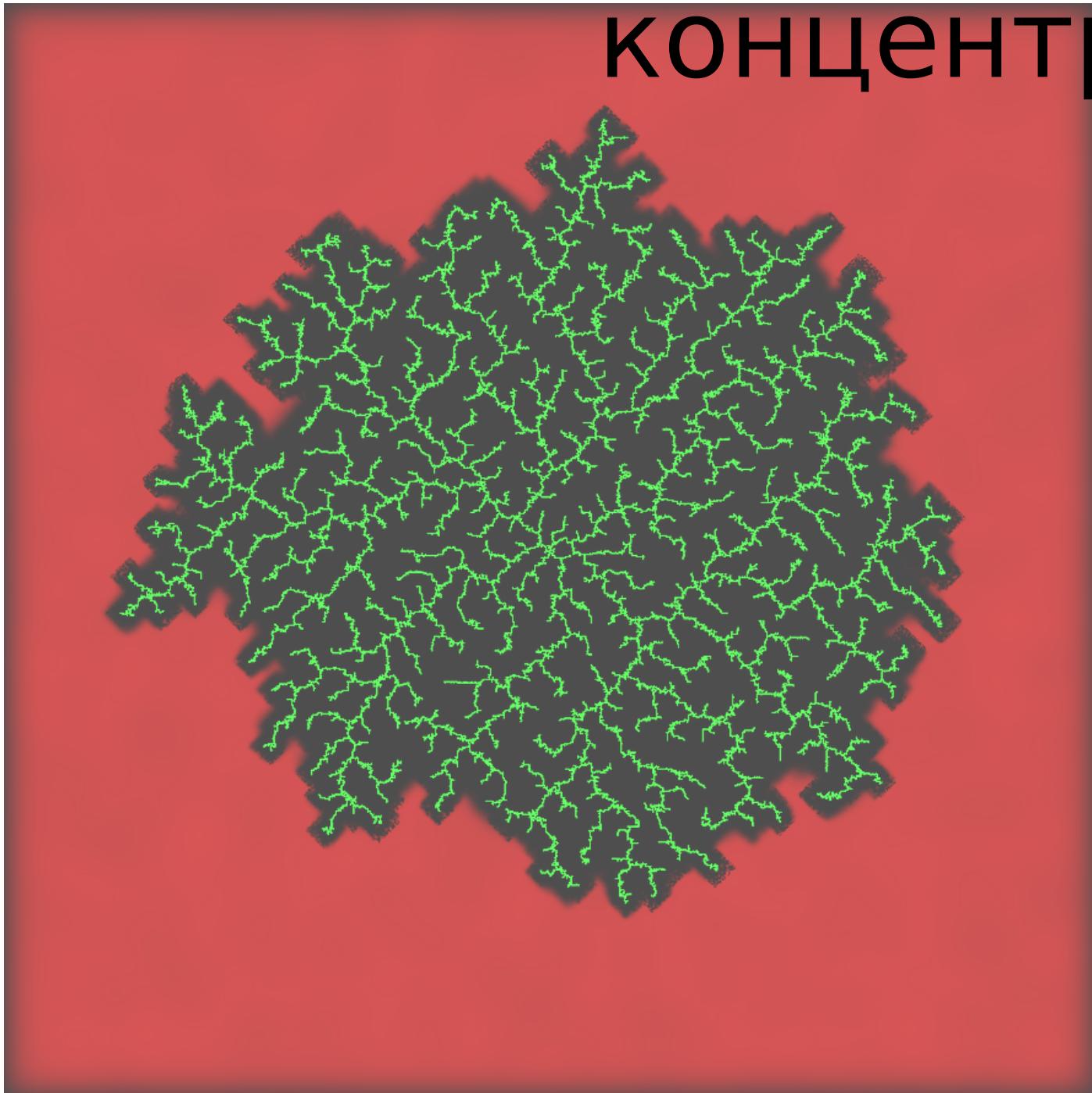


ниже стандартного 0.01s

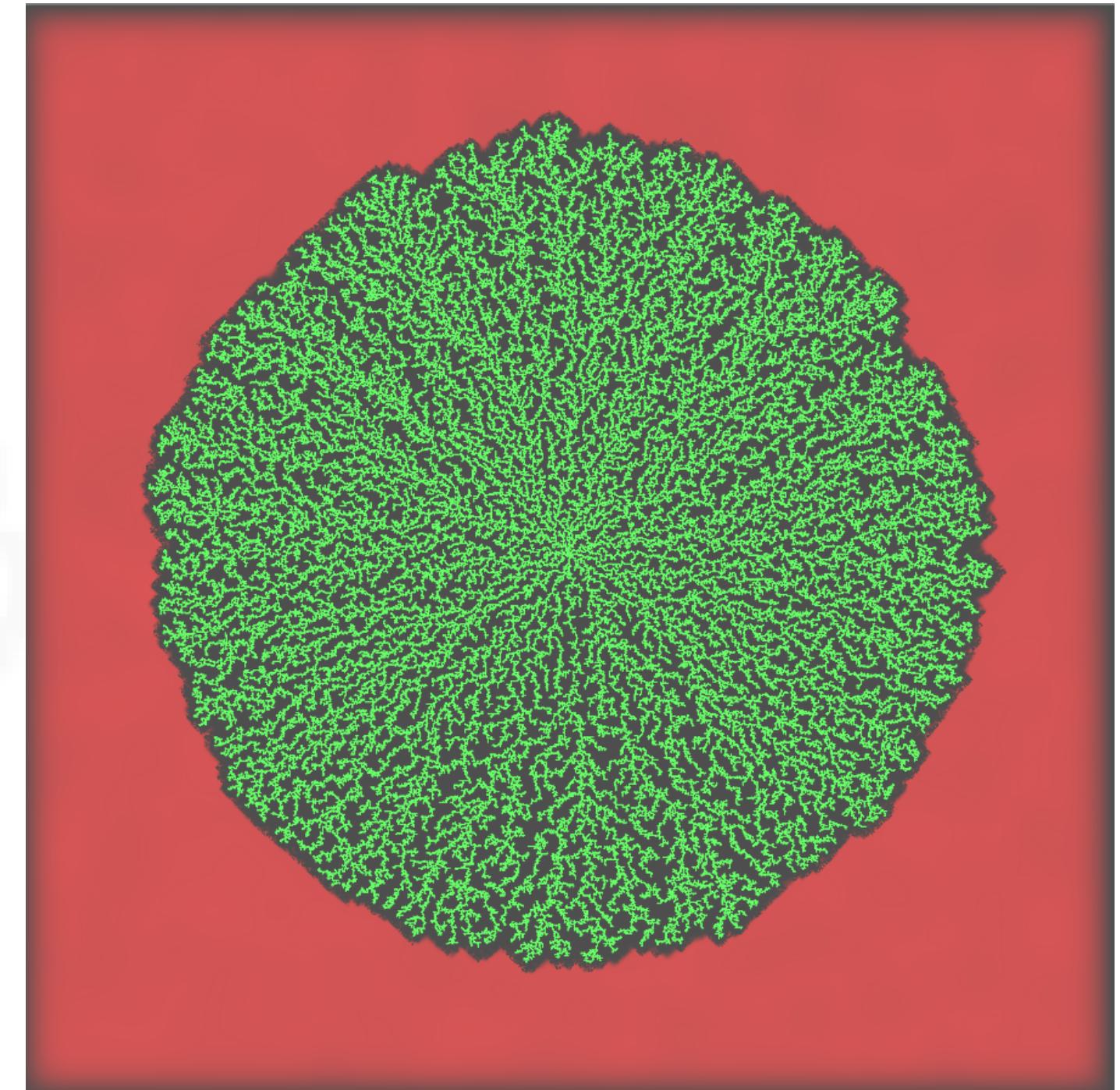


выше стандартного 2.5s

# Изменение начальной концентрации



ниже стандартного 0.5s



выше стандартного 1.5s

# Вывод

## Влияние физических параметров на форму кристаллов



## **Заключение**

В данной работе построена макроскопическая имитационная модель роста кристаллов из раствора, основанная на задании параметров физических процессов, проходящих при кристаллизации. Эта модель основана на рассмотрении элементарных объемов и численном решении уравнений диффузии и переноса вещества с использованием вероятностного подхода для описания кристаллизации и растворения.

# Ссылки и литература

- Баранов, В.Г. Моделирование процесса роста дендритных кристаллических структур / В.Г. Баранов, А.Г. Храмов // Компьютерная оптика. – 2001. – № 21. – С. 193-197.
- Малов, А.Н. Визуализация структур биологических жидкостей пленочно-кристаллографическим методом / А.Н. Малов, Е.С. Мусатова // Физика: Фундаментальные и прикладные исследования, образование. – 2014. – С. 106-109.
- Тарасевич, Ю.Ю. Диагностический метод клиновидной дегидратации биологических жидкостей с точки зрения физики / Ю.Ю. Тарасевич, И.В. Водолазская, О.П. Исакова // Клинико-лабораторный консилиум. – 2011. – № 2. – С. 60-62
- Еремеенкова, О. О. Исследование слезной жидкости человека методом биокристаллографии при воздействии низкоинтенсивного лазерного излучения : магистерская диссертация по направлению подготовки: 03.04.02 - Физика. - Барнаул, 2019