

Исследование плавления и затвердевания малых кластеров.

Отчет по 2 этапу проекта.

Лихтенштейн А.А., Рогожина Н.А., Шилоносов Д.В., Гэинэ А.

12 апреля 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Информация

- Рогожина Надежда Александровна
- студентка 3 курса НФИбд-02-22
- Российский университет дружбы народов
- <https://mikogreen.github.io/>

Цель и задание

Целью данного этапа является изучение теоретических основ метода молекулярной динамики и построение модели для исследования процессов плавления и затвердевания малых кластеров с “магическими” числами частиц.

1. Изучить теоретические основы метода молекулярной динамики
2. Рассмотреть особенности фазовых переходов в малых кластерах
3. Разработать физическую модель для исследования плавления и затвердевания малых кластеров с “магическими” числами частиц (7, 19, 37)
4. Определить необходимые параметры и алгоритмы для дальнейшего моделирования

Этап 2. Алгоритмы

1. Алгоритм генерации гексагональных кластеров

- **Цель:** Создание начальной конфигурации кластера с “магическими” числами частиц (7, 19, 37).
- **Шаги:**
 - 1.1 Центральная частица размещается в начале координат.
 - 1.2 Последующие частицы добавляются концентрическими оболочками вокруг центра.
 - 1.3 Для каждой оболочки рассчитываются координаты частиц с использованием углов и радиусов, обеспечивающих гексагональную симметрию.
- **Формула:** Координаты частиц в оболочке `shell`:

$$angle = \frac{2\pi i}{6 \cdot shell}, positions[i] = [shell \cdot b \cdot \cos(angle), shell \cdot b \cdot \sin(angle)]$$

2. Алгоритм Верле (скоростная форма)

- **Цель:** Интегрирование уравнений движения частиц с высокой точностью.
- **Шаги:**

2.1 Обновление скоростей на половину шага:

$$\vec{r}_i^{n+1/2} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i^n \cdot \frac{\Delta t}{2}$$

2.2 Обновление позиций:

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i^{n+1/2} \cdot \Delta t$$

2.3 Пересчёт ускорений на основе новых позиций.

2.4 Завершение обновления скоростей:

$$\vec{v}_i^{n+1} = \vec{v}_i^{n+1/2} + \vec{a}_i^{n+1} \cdot \frac{\Delta t}{2}$$

3. Расчёт термодинамических характеристик

- Температура:

$$T = \frac{2}{(2N - 3)k} \sum_i \frac{m_i (\vec{v}_i - \vec{v}_{cm})^2}{2}$$

где \vec{v}_{cm} — скорость центра масс кластера, k — постоянная Больцмана.

- Флуктуации длины связи:

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{N(N-1)} \sum_{i < j} \frac{\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2}{\langle r_{ij} \rangle}}$$

- Теплоемкость:

$$C = \frac{dE}{dT}$$

4. Анализ фазовых переходов

- Методы:
 - Пик теплоемкости: Определяется через производную энергии по температуре.
- Критерий Линдемманна: Плавление фиксируется при превышении порога флуктуаций длины связи (обычно 0.1).
- Гистерезис: Сравнение кривых нагрева и охлаждения для выявления различий.

5. Визуализация данных

- Методы:
 - Построение графиков зависимостей (температура, энергия, теплоемкость).
 - Анимация движения частиц с отображением связей.
 - Парная корреляционная функция для анализа структуры.

6. Анализ зависимости температуры плавления от размера кластера

- Формула:

$$T_{melt} = T_{bulk} = -\frac{c}{N^{1/3}}$$

- Метод: Линейная регрессия для определения T_{bulk} и c .

- **Стабильность:** Ограничение максимальных сил и скоростей для предотвращения численных ошибок.
- **Гибкость:** Поддержка различных “магических” чисел и размеров кластеров.
- **Автоматизация:** Интеграция всех этапов (генерация, моделирование, анализ, визуализация) в единый pipeline (`main.py`).

Выводы

Эти алгоритмы позволяют исследовать уникальные свойства нанокластеров, такие как оболочечное плавление и размерные эффекты, что соответствует целям работы.