

ТРЕТЬЕ ЗАДАНИЕ

Автор: Маллаев Руслан

От: 19 апреля 2022 г.

Содержание

1 Наблюдение плавления кристалла	1
2 Определение температуры плавления по критерию Линдеманна	2
3 Распределение отклонений частиц от положений равновесия	3
4 Дополнительно	3

1 Наблюдение плавления кристалла

В данном пункте требовалось применить калориметрический критерий плавления, проанаблюдать скачок на зависимости энергии от температуры. Для наблюдения использовалась система с 6912 частицами с постоянной плотностью 1.0 и 1.1.

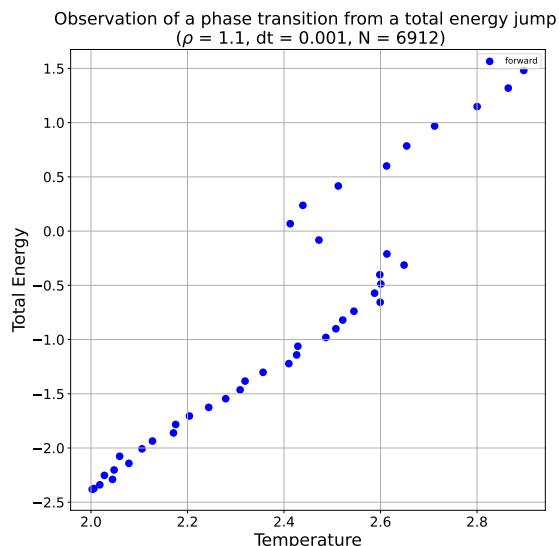
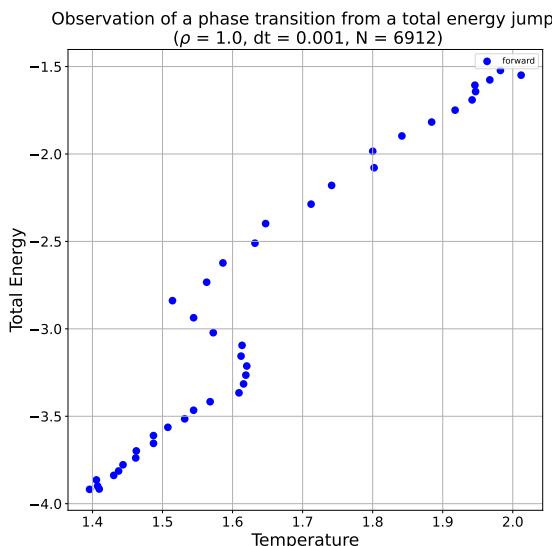


Рис. 1: Зависимость энергии от температуры при $\rho = 1.0$

Рис. 2: Зависимость энергии от температуры при $\rho = 1.1$

По графикам хорошо заметен фазовый переход. В первом случае он происходит при $T \approx 1.6$, а во втором при $T \approx 2.5$. Также заметно, что кристалл сначала "перегревается" а только потом начинает плавиться. Ниже будут представлены кадры из отрисовки двух вышеупомянутых систем в трех состояниях: в состоянии равновесного кристалла, в момент фазового перехода и в состоянии равновесной жидкости. По этим кадрам видно, что фазовый переход происходит не моментально "везде и сразу" а начинается с некоторого очага и происходит постепенно.

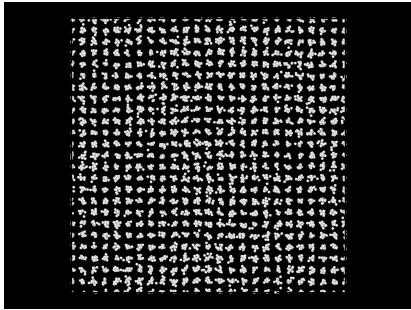


Рис. 3: Система с $\rho = 1.0$ в состоянии кристалла

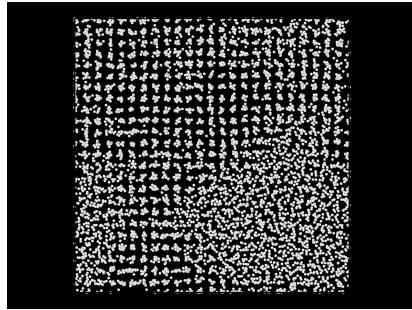


Рис. 4: Система с $\rho = 1.0$ в момент фазового перехода

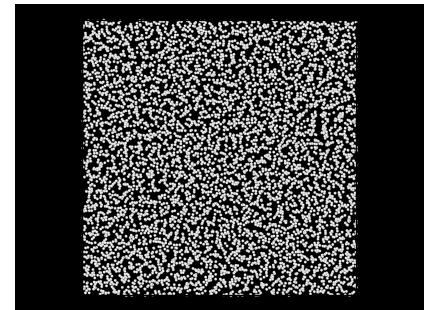


Рис. 5: Система с $\rho = 1.0$ в жидком состоянии

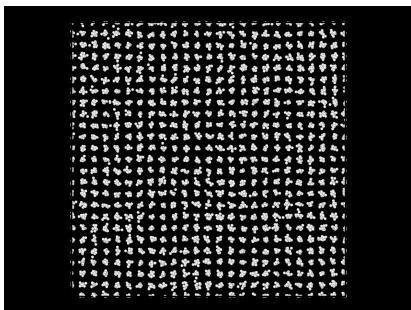


Рис. 6: Система с $\rho = 1.1$ в состоянии кристалла

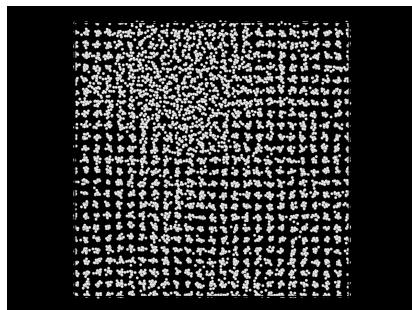


Рис. 7: Система с $\rho = 1.1$ в момент фазового перехода

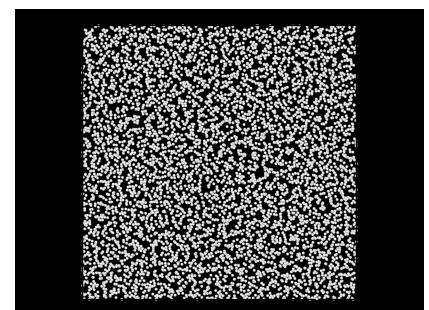


Рис. 8: Система с $\rho = 1.1$ в жидком состоянии

2 Определение температуры плавления по критерию Линдеманна

Здесь требовалось построить зависимость среднеквадратичного отклонения частиц, нормированного на постоянную решетки, от температуры на некоторой изохоре. Моделировалось 6912 частиц при плотности $\rho = 1.0$. Было решено определять температуру при критерии Линдемана равном 0.12. Полученный результат температуры плавления $T = 1.63$ полностью согласуется с полученным ранее.

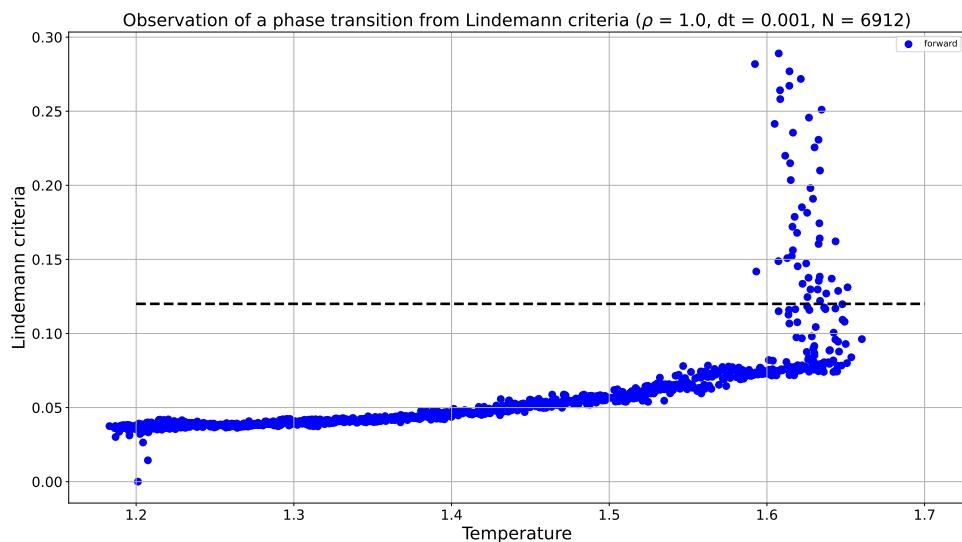


Рис. 9: Критерий Линдеманна от температуры при $\rho = 1.0$

3 Распределение отклонений частиц от положений равновесия

В данном пункте надо было построить распределение отклонений частиц от положения равновесия. Расчет проводился для $4 \cdot 10^6$ частиц при постоянных плотности и температуре $\rho = 1.2, T = 1.0$. Распределение, полученное в этом пункте, похоже на максвелловское.

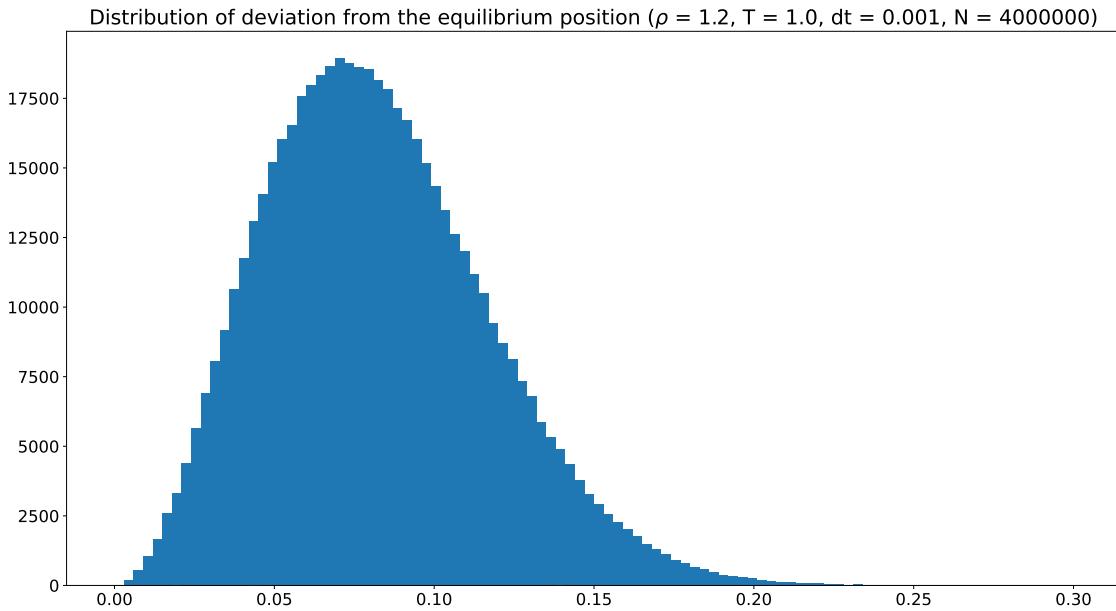


Рис. 10: Распределение отклонений частиц от положений равновесия

4 Дополнительно

При выполнении работы мною был замечен интересный артефакт. Когда я проводил моделирование для первого пункта изначально я выбрал не очень удачную начальную точку на фазовой диаграмме ($\rho = 0.8, T = 0.4$). На фазовой диаграмме эта точка соответствует смешанному состоянию газ/кристалл. При этом мне все же удалось зафиксировать фазовый переход, но интересно то, что при отрисовке с ovito получается, что в кристалле образуется "пузырек с которого вскоре и начинается фазовый переход в жидкое состояние при температуре $T \approx 0.6$, что соответствует данным с фазовой диаграммы.

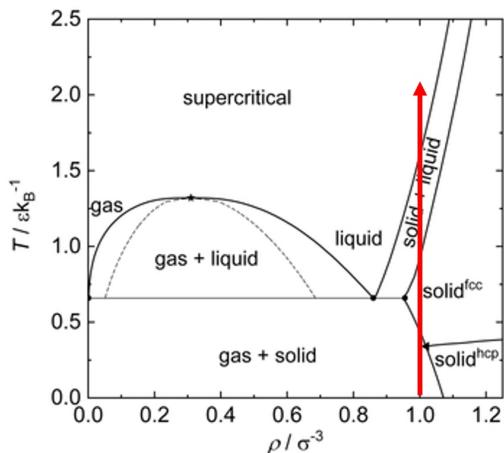


Рис. 11: Фазовая диаграмма

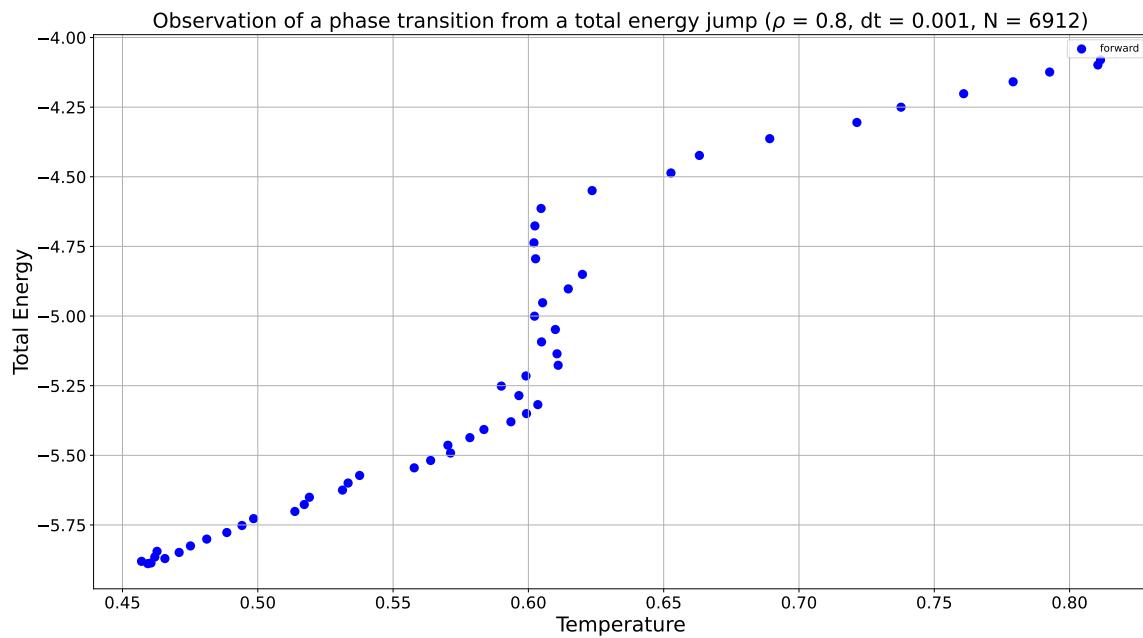


Рис. 12: Зависимость энергии от температуры при $\rho = 0.8$

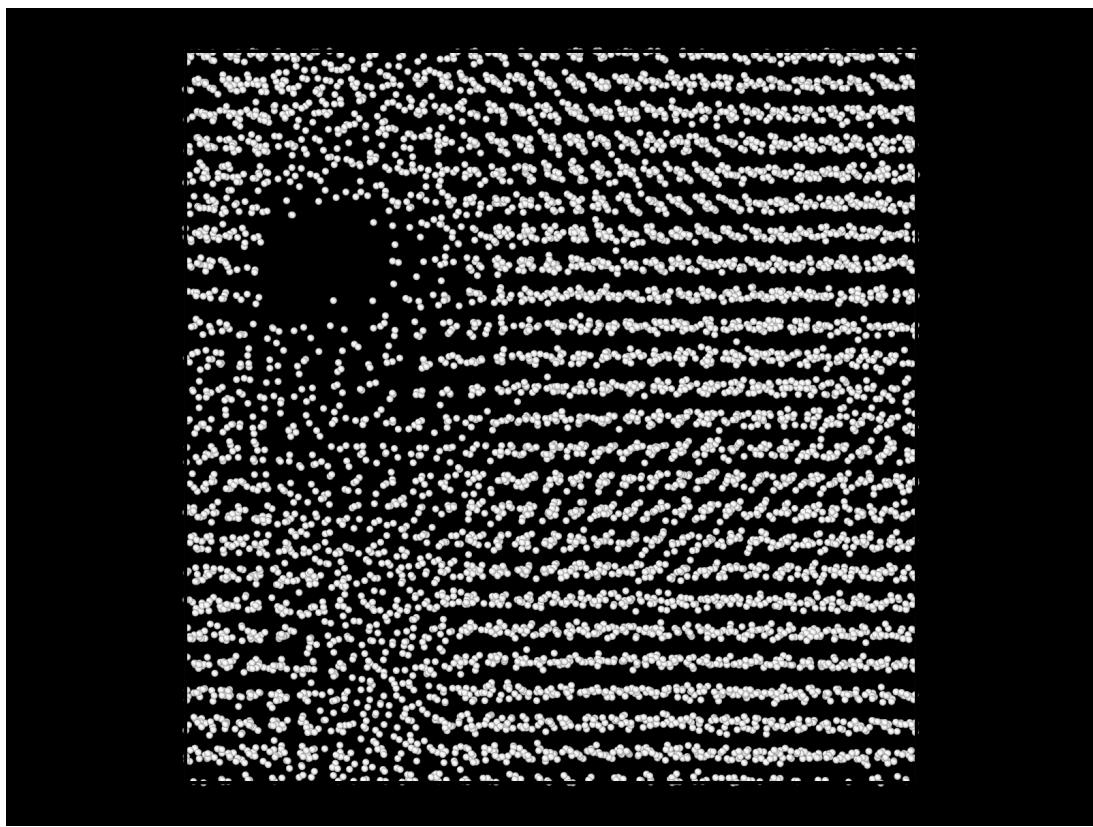


Рис. 13: Кадр из OVITO с "пузырьком" @

Также дополнительно на занятии было проверено, что дальний порядок радиальной функции распределения пропадает при фазовом переходе, а так же тот критерий фазового прахеода, который гласит что во время плавления кристалла отношение Первого максимума и первого минимума на графике функции радиального распределения примерно равно 5 (в моем случае 5.43).

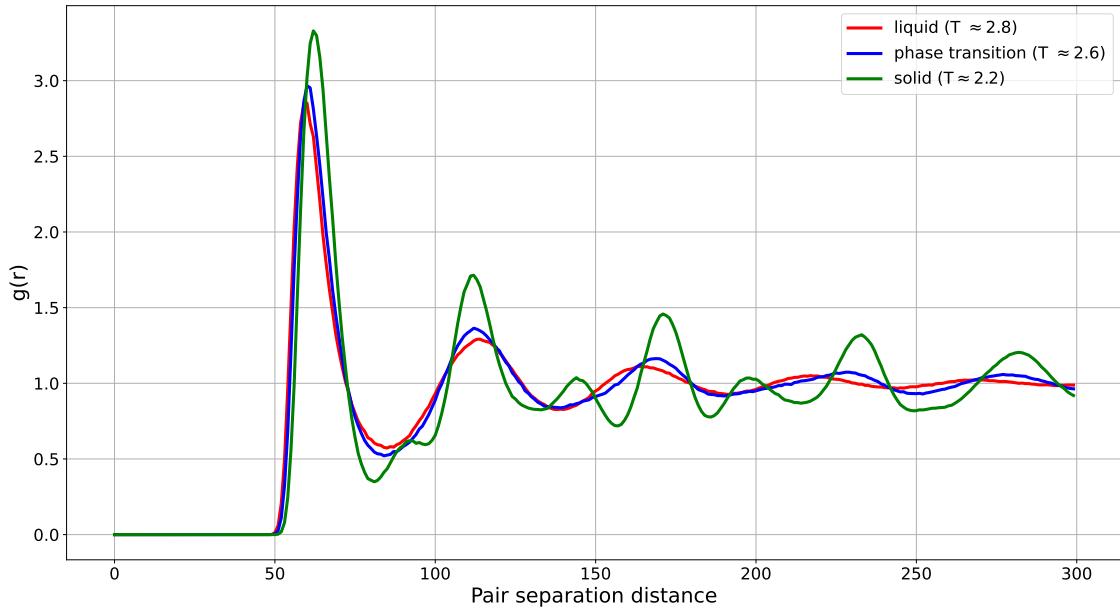


Рис. 14: Радиальная функция распределения при плавлении кристалла (6912 частиц)

Была построена дополнительная гистограмма для третьего пункта для значений отклонения от положения равновесия только по оси X

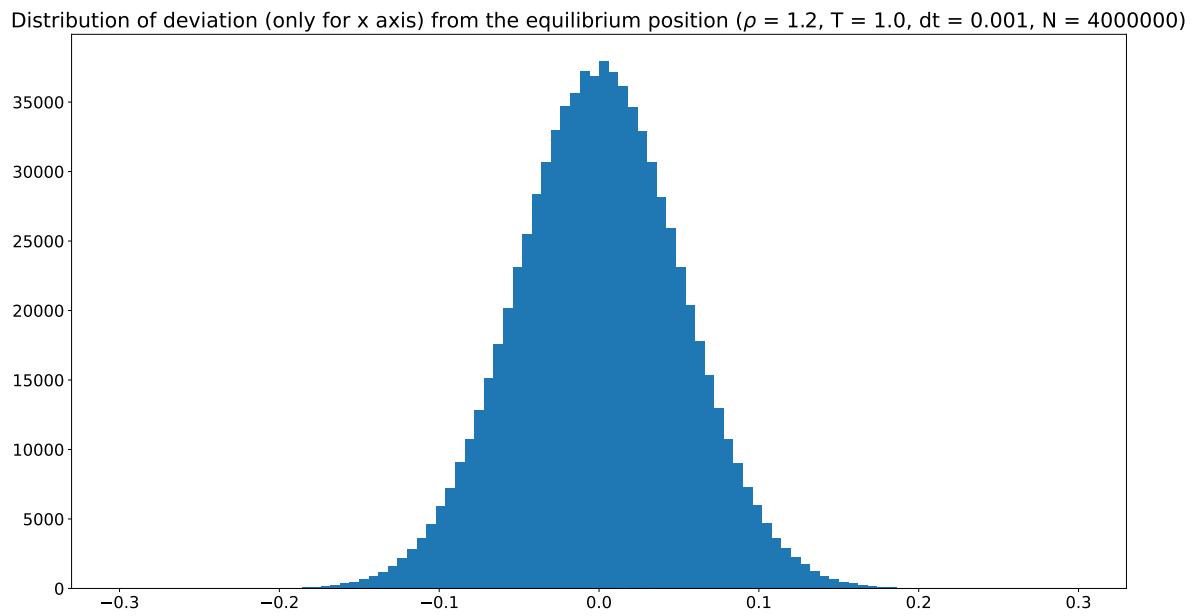


Рис. 15: Распределение отклонений частиц от положений равновесия по оси x