

## **Использование прямоугольного потенциала при имитационном моделировании фазовых переходов в простых кристаллах**

*Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е.Жуковского «ХАИ»*

### **Введение**

Наиболее существенную роль компьютеры в научных исследованиях играют там, где требуется огромное количество численных расчетов или задачи не могут быть решены простыми аналитическими методами, в частности задачи многих тел. Так, описание поведения твердых и жидких тел - одна из наиболее трудных задач.

В реальных телах частицы (молекулы и атомы) связаны друг с другом силами различной величины и природы: с помощью химической связи, межмолекулярных водородных и других взаимодействий, электростатическими и электромагнитными силами. Потенциалы взаимодействия сложным образом зависят от расстояния и направления. Очевидно, в таком общем виде понять и описать свойства тела невозможно или чрезвычайно трудно, нужны существенные упрощения.

Основные вопросы: какие взаимодействия качественно определяют поведение и свойства молекулярных систем и что можно было бы выбрать за базовую простейшую модель, усложняя которую далее можно было бы приблизиться к описанию биомакромолекул и реальных тел.

Благодаря стремительному развитию вычислительной техники, методы компьютерного моделирования позволяют получить детальные количественные сведения о поведении сложных молекулярных систем, известных в природе или, что важнее, еще только планируемых к созданию. Сопоставляя результаты вычислений с опытными данными, можно выявить наиболее важные факторы и закономерности, отвечающие за те или иные свойства реальных молекул.

### **Постановка задачи**

Рассматривается задача моделирования процессов кристаллизации и плавления твердых тел. В качестве примера предлагается рассмотреть вещества с ионной кристаллической решёткой.

Сформулируем возникающие задачи:

- выбрать или создать алгоритм для реализации поставленной задачи;
- определить зависимость типа кристаллической решётки от геометрических параметров потенциала;
- определить зависимость потенциальной составляющей внутренней энергии от температуры;
- установить степень адекватности предложенной модели реальному поведению совокупности атомов (ионов) реального вещества.

## Решение поставленных задач

Предлагается использовать событийный алгоритм в применении к методу частиц [1–3], который заключается в представлении тела совокупностью взаимодействующих частиц (материальных точек или твердых тел), описываемых законами классической механики. Этот алгоритм является оптимальным по затратам времени расчетов на ЭВМ. Набор моментов столкновений частиц заполняет числовую ось времени. Сами столкновения реализуются в определённой последовательности, получаемой упорядочиванием этих моментов в порядке возрастания. Упорядочение эквивалентно построению очереди. Используется очередь, построенная на базе хипа. После некоторого события следующим будет то, для которого время наступления минимально. После столкновения пары частиц требуется рассчитать время наступления очередного события для каждой частицы рассматриваемой пары и поставить вычисленные моменты времени в очередь. Система в целом разбивается на подсистемы [4]. При этом вводятся новые события, связанные с переходом из одной подсистемы в другую. Представление модельных частиц в виде автоматов позволяет перемещать только те из частиц, которые участвуют в событии.

Каждая частица (ион) представляется при программировании структурой, среди полей которой необходимыми являются геометрические и физические свойства, координаты центра частицы, координаты вектора скорости, локальное время, момент времени наступления ближайшего события, тип ближайшего события, номер частицы, с которой должно произойти ближайшее по времени событие, а также мультииндекс ячейки, в которой находится частица.

Зададим парное взаимодействие следующим образом:

- пусть  $\rho_{ij} = |\vec{x}_j - \vec{x}_i|$  -- расстояние между центрами модельных частиц с номерами  $i$  и  $j$ ; если  $\rho_{ij}$  превышает величину  $D_{\text{внешн}}$ , то частицы перемещаются свободно;
- если выполняется неравенство  $D_{\text{внутр}} < \rho_{ij} < D_{\text{внешн}}$ , то потенциальная составляющая  $U$  полной энергии движения обеих частиц является постоянной отрицательной величиной;

при выполнении равенства  $\rho_{ij} = D_{\text{внутр}}$  происходит упругое отражение.

Графически рассмотренный потенциал представлен на (рис. 1).

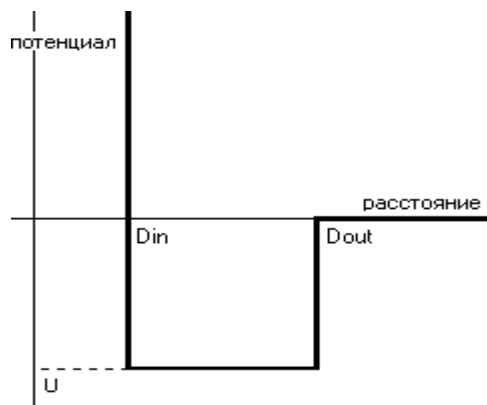


Рис. 1. Прямоугольный потенциал

Каждая из частиц моделируется в виде двух концентрических сфер. Внутренние сферы радиусами  $R_{0i}$  и  $R_{0j}$  абсолютно упруги; если расстояние между частицами превышает сумму радиусов внешних сфер, равную  $D_{\text{внешн}}$ , то частицы не взаимодействуют. Если  $\rho > D_{\text{внешн}}$ , потенциал взаимодействия равен нулю. Существенно то, что в моменты времени, когда не выполняется ни одно из равенств  $\rho = D_{\text{внешн}}$ ,  $\rho = D_{\text{внутр}}$ , частицы перемещаются прямолинейно и равномерно.

Если частицы попадают в потенциальную яму, то они становятся соседями. Значит, для каждой из частиц необходимо предусмотреть отдельное поле динамического одномерного массива номеров соседних частиц, центры которых удалены от центра рассматриваемой частицы на расстояние, меньшее диаметра.

### Результаты расчетов

Рассмотрен процесс кристаллизации вещества, состоящего из ионов двух типов. Для этого предварительно заданы законы взаимодействия модельных частиц, что сводится к заполнению таблицы, отображающей такие параметры, как внешний и внутренний диаметры взаимодействий для каждой пары взаимодействующих модельных частиц, а также значения потенциалов парных взаимодействий. Подбирая различные параметры потенциальной ямы, добиваемся возникновения процессов кристаллизации и образования кристаллических решёток различных типов.

Экспериментальным путём была получена зависимость типа кристаллической решётки и соответственно координационного числа от отношения внутреннего диаметра взаимодействия разноимённых ионов ( $D_{12}$ ) к внутреннему диаметру взаимодействия положительных ионов ( $D_{11}$ ) (таб. 1).

Таб. 1.

Отношение диаметров	Координационное число
0.24—0.54	3
0.54—0.68	4
0.68—0.83	6
0.83—1.00	8

В таб. 2 приведены параметры взаимодействия ионов двух типов.

Таб. 2.

D1	1	2
1	0.38	0.28
2	0.28	0.38

D0	1	2
1	0.38	0.27
2	0.27	0.38

U	1	2
1	0.00	-1
2	-1	0.00

Vzaimod.	1	2
1	0	1
2	1	0

Количество ионов первого и второго типа выберем порядка нескольких десятков, чтобы на рисунке было легче определить тип образовавшейся кристаллической решетки.

На рис.2 приведен результат вычислений получения кристалла при выбранных параметрах:

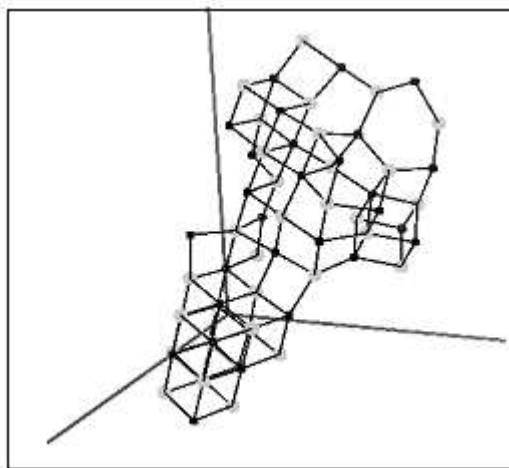


Рис. 2. Кристаллизация хлорида натрия

Получен устойчивый кристалл с кубической кристаллической решёткой, константа решётки  $a=0.28$ . Будем считать, что этот кристалл соответствует кристаллу хлорида натрия. Т.к. константа решетки NaCl равна 2.8 ангстрем, то 0.28 условных единиц соответствует 2.8 ангстремам.

Задав геометрические параметры потенциалов взаимодействия и размеры ионов элементов, полученные экспериментально в процессе кристаллизации, можно изначально построить соответствующий кристалл правильной формы (рис. 3). Такая модель при подведении энергии извне позволяет проследить за процессом плавления.

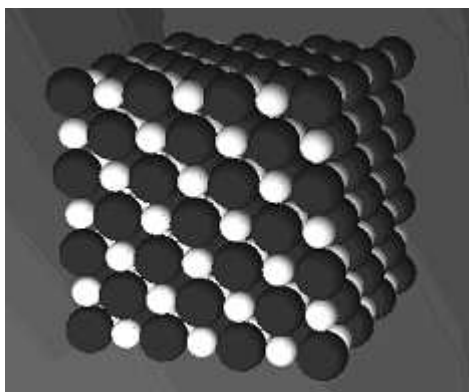


Рис. 3. Кристалл хлорида натрия

Проведено имитационное моделирование процесса плавления модельного кристалла хлорида натрия. Ширина потенциальной ямы  $d$  принята равной 0.1; начальное значение температуры, пропорциональной квадрату средней тепловой скорости, принимается малым. Затем с шагом 0.01 производится увеличение тепловой скорости, что соответствует подведению энергии извне. При каждом

значении модельной температуры после установления теплового равновесия подсчитывается потенциальная составляющая внутренней энергии  $U_{sum}$  одной частицы. Аналогичные опыты повторяются для ширины потенциальной ямы  $d=0.05$  и  $d=0.2$ . Зависимость величины  $U_{sum}$  от температуры приведена на рис. 4.

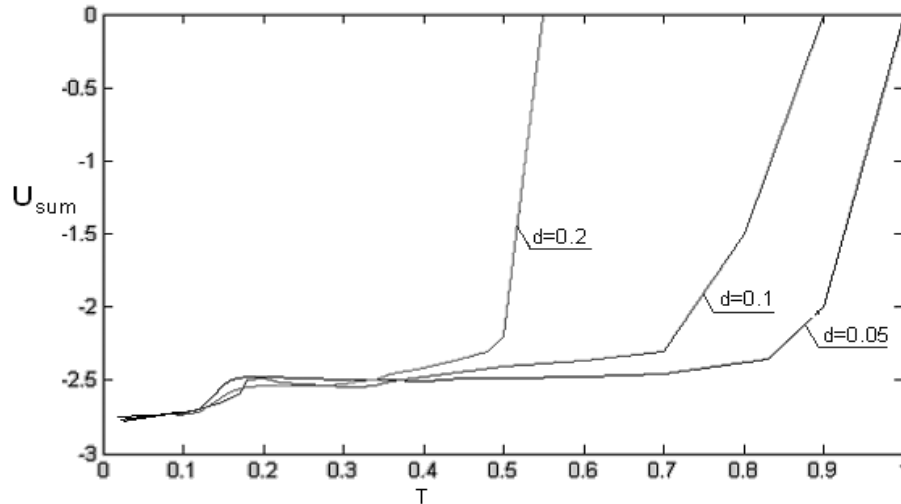


Рис. 4. Зависимость потенциальной составляющей внутренней энергии от температуры.

Круто падающие участки диаграммы ( $T, U_{sum}$ ) соответствуют фазовым переходам. Первый участок соответствует перекристаллизации, связанной с изменением формы основной ячейки и поглощением энергии. Дальнейшее повышение температуры приводит к потере дальнего порядка и появлению жидкой фазы, что также требует подведения энергии извне. Чем больше ширина потенциальной ямы, тем менее устойчивой является система и тем меньше температура плавления. Т.к. для хлорида натрия было изначально выбрано  $d=0.1$ , то температура плавления составляет  $T=0.7$ . Этой модельной температуре соответствует экспериментально замеренная температура плавления  $T=800.8^{\circ}\text{C}$ .

Аналогично проведено моделирование кристалла KCl. Изменения параметров отражены в таб. 3.

Таб. 3

D0	1	2
1	0.43	0.30
2	0.30	0.43

D1	1	2
1	0.43	0.31
2	0.31	0.43

Константа кристаллической решётки выбрана 0.31, поскольку действительная константа решётки кристалла KCl равна 3.1 ангстрема. На рис. 5 приведен график зависимости потенциальной составляющей внутренней энергии от температуры для кристалла KCl.

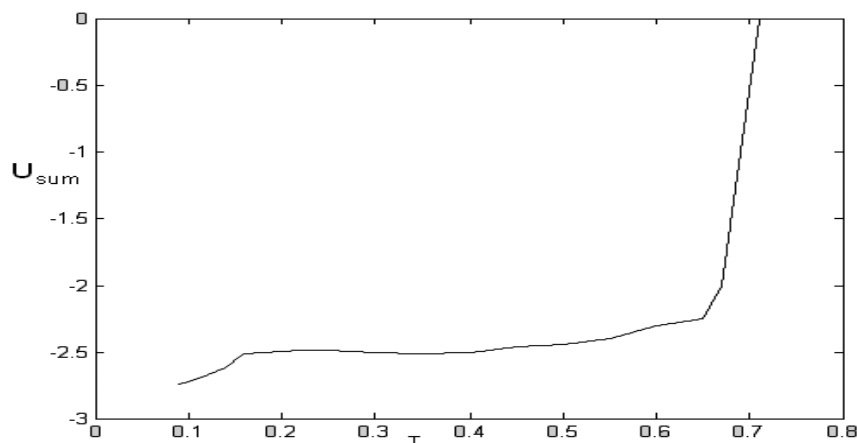


Рис. 5. Зависимость потенциальной составляющей внутренней энергии от температуры для KCl.

По графику видно, что температура плавления составляет  $T=0.68$ , что соответствует  $777.9^{\circ}\text{C}$ . Действительная же температура плавления кристалла хлорида калия  $776^{\circ}\text{C}$ , которая почти совпадает с полученными данными.

### Выводы

Дискретно-событийное моделирование позволяет рассчитывать температуры фазовых переходов, плавлений кристаллов простых веществ. Однако требуется предварительная идентификация математической модели по имеющимся экспериментальным зависимостям.

В дальнейшем предполагается уточнить вид потенциала путём введения потенциальных барьеров.

### Список литературы

1. Чернышев Ю.К. Прямое моделирование течения газа в каналах сложной формы при малых числах Кнудсена // Труды Междунар. науч.-техн. конф. «Совершенствование турбоустановок методами математического и физического моделирования». – Х.: Ин-т проблем машиностроения НАН Украины. – 1997. – С. 238 – 240.
2. Чернышев Ю.К. Применение теории систем для алгоритмизации прямого математического моделирования течения газа // Двигатели внутреннего сгорания. – 2004. – № 2. – С. 44–47.
3. Чернышев Ю.К. Решение задач имитационного моделирования поведения большого количества модельных частиц. // Х.: ХАИ. – 2006. – 58 с.
4. Левин С.С., Чернышев Ю.К. Алгоритмизация событийного перемещения частицы в триангулярной сетке при имитационном моделировании течения газа // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии. – Х.: НАКУ «ХАИ». – 2004. – Вып. 23. – С. 122 – 127.