

УДК 536.421

Построение функций радиального распределения методом смещения решеток для жидкостей

Крючков Н.П.

Студент, кафедра «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия

*Научный руководитель: Юрченко С.О., к.ф.-м.н. доцент кафедры «Физика»,
с.н.с., зав. лабораторией «Терагерцовая оптотехника» НОЦ «Фотоника и ИК-техника»,
МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия*

МГТУ им. Н.Э. Баумана

Kruchkov_nkt@mail.ru

Процессы, протекающие в конденсированных средах, особенно в жидкостях, играют важную роль в современных инженерно-технических задачах. Однако, законченной теории конденсированного состояния на сегодняшний день не существует, что снижает эффективность использования этих процессов. При описании различных структур, значительная роль отводится функциям радиального распределения. Но, несмотря на попытки теоретического построения этих функций, например [1], на сегодняшний день они получаются либо в результате эксперимента, либо в результате численного моделирования.

В работе [2] был предложен новый способ описания неупорядоченных структур. Он основан на использовании ФРР, для построения, которых был предложен новый способ, основанный на введении s-функций, которые представляют собой плотности вероятности одного из ближайших узлов кристалла.

В работе [3] было продемонстрировано, что метод s-функций позволяет построить ФРР для трехмерных систем Леннарда-Джонса (ЛД), находящихся в гранецентрированной (ГЦК) и гексагональной решетках (ГПУ). Было показано, что в области твердых фаз, зависимости $\eta_{fcc}^2(T)$ и $\eta_{hcp}^2(T)$ для ГЦК и ГПУ решеток соответственно, близки к линейным. Стоит отдельно отметить тот факт, что значения коэффициентов линейной аппроксимации зависимостей $\eta_{fcc}^2(T)$ и $\eta_{hcp}^2(T)$ оказались очень близки. Совершенно аналогичная ситуация наблюдается в случае Дебаевской системы [4]. Однако, при плавлении ЛД системы, вид ФРР претерпевал скачкообразное изменение, что влечет за собой аналогичное изменение зависимостей $\eta^2(T)$.

Данная работа посвящена проверке гипотезы, согласно которой, можно избежать скачка зависимости $\eta^2(T)$ в точке плавления, если изменить правило суммирования при переходе к жидкой фазе. В частности рассматривать жидкую фазу как результат 'смещения' решеток.

Описание методики построения ФРР жидкости. Моделирования методами МД выполнялись при помощи пакет LAMMPS [5]. В исследуемую систему входило порядка $2.5 \cdot 10^4$ частиц, взаимодействующих по потенциалу ЛД:

$$U(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

Моделирования выполнялись в безразмерных единицах ЛД: $\epsilon = 1$, $\sigma = 1$ и для

систем, концентрация которых равнялась единице.

Для построения ФРР_s методом, описанным в работе [2] необходимо выбрать некоторую аппроксимацию реальной s-функции. В настоящей работе s-функция была выбрана в виде:

$$\tilde{s}(r, \eta, A) = \exp \left(-\frac{|r - A|^2}{2\eta^2} \right) - 0,1$$

$$s(r, \eta, A) = \begin{cases} \tilde{s}(r, \eta, A) & \tilde{s}(r, \eta, A) > 0 \\ 0 & \tilde{s}(r, \eta, A) < 0 \end{cases}$$

где значение 0,1 (выбирается в некоторой степени произвольно, важно, чтобы было меньше единицы) в выражении для $\tilde{s}$ введено с целью определить локализацию узла в конечной области пространства (обычная функция Гаусса отлична от нуля во всем пространстве).

Построение ФРР методом s-функций $g_s = g_s(r, A, \eta)$, выполнялось для наборов параметров (A, η) таких, что $A = 0,8..1,2$ с шагом $5 \cdot 10^{-3}$ и $\eta = 0,01..0,21$ с шагом $1 \cdot 10^{-4}$. В итоге были полученные наборы ФРР для гранецентрированных $g_{s,fcc}(r, A, \eta)$, объемно центрированных (ОЦК) $g_{s,bcc}(r, A, \eta)$, гексагональных плотно упакованных $g_{s,hcp}(r, A, \eta)$ и кубических (ПК) $g_{s,sc}(r, A, \eta)$ решеток. Функции g_s и g были нормированы на единицу:

$$\int g_s(r, A, \eta) dr = \int g(r, T) dr = 1$$

Было выдвинуто предположение, что ФРР жидкой фазы, можно представить как результат, смешения ФРР_s, соответствующих разным кристаллическим решеткам:

$$g_{s,L}(r, \eta, A, \alpha, \beta, \gamma, \omega) = \frac{\alpha}{\lambda} g_{s,fcc}(r, \eta, k_{fcc}A) + \frac{\beta}{\lambda} g_{s,bcc}(r, \eta, k_{bcc}A) +$$

$$+ \frac{\gamma}{\lambda} g_{s,hcp}(r, \eta, k_{hcp}A) + \frac{\omega}{\lambda} g_{s,sc}(r, \eta, k_{sc}A)$$

$$\lambda = \alpha + \beta + \gamma + \omega$$

При смешении ФРР_s, соответствующие им концентрации, должны быть одинаковы, что влечет за собой необходимость введения коэффициентов $k_{fcc} = 1.12$, $k_{bcc} = 1.09$, $k_{hcp} = 1.12$, $k_{sc} = 1$. При использовании выражения (3), значения аргументов, в комбинациях вида $k_{str}A$ округлялись до ближайшего значения по сетке A . Значение параметра η определялись на основе зависимостей $\eta_{fcc}^2(T)$ и $\eta_{hcp}^2(T)$ для кристаллических фаз [3]:

$$\eta_s^2(T) = 9.7 \cdot 10^{-3} T$$

Результаты. На Рис.1 представлены сопоставления ФРР_s для $T = 1.8$ ($\eta^2 = \eta_s^2(1.8)$) с ФРР, полученными методами МД. Параметр A взят равным 1, что в случае идеальных кристаллических решеток будет соответствовать концентрации системы $n = 1$. Рис.1.а-Рис.1.д соответствуют сравнению ФРР_s кристаллических решеток (ГЦК, ОЦК, ГПУ, ПК) с ФРР жидкой фазы. Можно сделать вывод, что структура жидкой фазы системы ЛД отлична от структуры приведенных кристаллических решеток, что выражается в определенных расхождениях теоретических ФРР_s с экспериментальными.

На Рис.1.е-Рис.1.ф представлены ФРР_{s,m} построенные методом смешения ФРР_s различных решеток в равных пропорциях. Можно сделать вывод, что полученные зависимости соответствуют ФРР жидкости гораздо лучше, чем ФРР_s чистых кристаллических решеток. Тот факт, что лучшее совпадение результатов наблюдается при $A = 0.975$, а не $A = 1$, может быть объяснен тем, что согласно результатам [3] зависимость $A(T)$ медленно убывает с ростом температуры. Таким образом, можно сделать вывод, что метод смешения приводит к построению ФРР_{s,m} которые соответствуют реальным ФРР

гораздо лучше, нежели $\Phi P P_s$ построенные на основе чистых решеток.

На Рис.2.b-Рис.2.c представлены сопоставления $\Phi P P$ и $\Phi P P_s$ для жидкой фазы, где $\Phi P P_s$ построены в предположении скачкообразного изменения η при плавлении (по данным работы [3]). Сопоставляя график Рис.2.a с графиками Рис.2.b-Рис.2.c, можно прийти к выводу, что $\Phi P P_{s,m}$ жидкой фазы, построенные методом смешения решеток, сходятся с экспериментальными результатами гораздо лучше, чем при построение, основанном на предположение о скачкообразном изменении η^2 при плавлении.

Заключение. Таким образом было показано, что используя линейную зависимости $\eta_s^2(T)$, полученную для кристаллической фазы, и выражение (3), представляющее собой смешение решеток, можно получить $\Phi P P_{s,m}$ жидкой фазы, которые достаточно точно совпадают с результатами МД. Наблюдающиеся расхождения $\Phi P P$ и $\Phi P P_{s,m}$ могут быть связаны с выбором аппроксимации s-функции, которая недостаточно точно отражает температурную зависимость реальной s-функции.

Список литературы

1. T. W. Cochran, Y. C. Chiew Radial distribution function of freely jointed hard-sphere chains in the solid phase // Journal of Chemical Physics.- 2006.-Vol. 124, no. 7.- P. 074901.- <http://dx.doi.org/10.1063/1.2167644>.
2. Structure of the nanobubble clusters of dissolved air in liquid media / Bunkin N.F., Yurchenko S.O., Suyazov N.V., V.Kozlov // Journal of Biological Physics.- 2012.-Vol. 38, no. 1.- P. 121–152.
3. Юрченко С.О., Крючков Н.П. Неупорядоченные состояния и функции парного распределения в Леннард Джонсовской системе // .-2012.
4. Юрченко С.О., Крючков Н.П. Исследование переходов «порядок-беспорядок» в плазменных кристаллах // .-2012

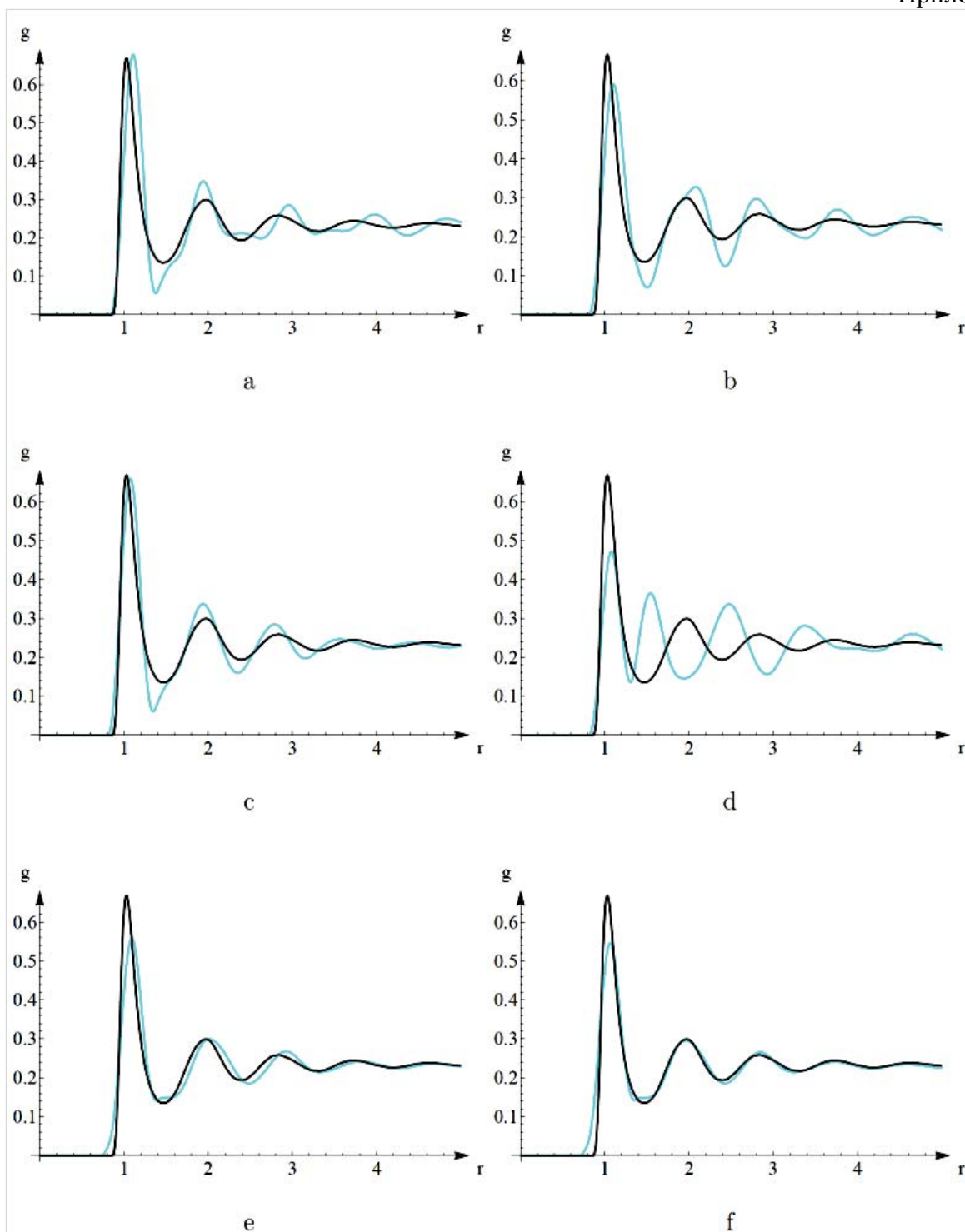


Рис. 1.

Сопоставление ФРП ЛД жидкости при $T = 1.8$, полученных методом МД ($g(r)$, темные линии) и методом s-функций ($g_{s,L}(r, \eta, A, \alpha, \beta, \gamma, \omega)$, светлые):

- а) $g_{s,L}(r, 0.13, 1, 1, 0, 0, 0)$ – fcc; б) $g_{s,L}(r, 0.13, 1, 0, 1, 0, 0)$ – bcc; в) $g_{s,L}(r, 0.13, 1, 0, 0, 1, 0)$ – hcp; д) $g_{s,L}(r, 0.13, 1, 0, 0, 0, 1)$ – sc; е) $g_{s,L}(r, 0.13, 1, 1, 1, 1, 1)$; ф) $g_{s,L}(r, 0.13, 0.975, 1, 1, 1, 1)$;

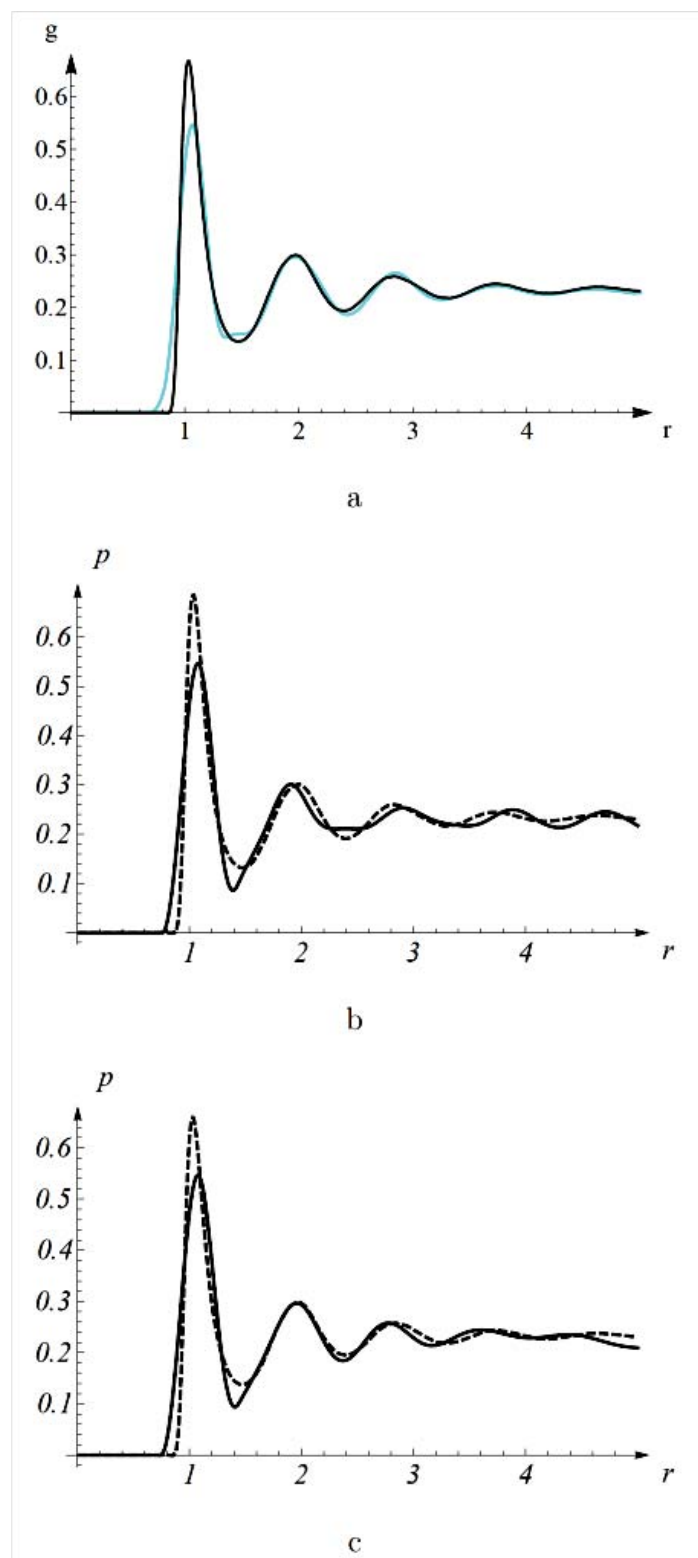


Рис. 2.

а) Повтор Рис.1.f; б)-с) ФРР для ГЦК и ГПУ решеток соответственно, построенные методом s-функций, в предположение скачкообразного изменения параметра η при плавлении системы; пунктир – результаты МД, сплошная – методы s-функций; (по данным работы [3])