

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М. В. Ломоносова

XXX Международная конференция
студентов, аспирантов и молодых ученых
по фундаментальным наукам



Международный
молодежный научный форум

“ЛОМОНОСОВ–2023”

Секция **“ФИЗИКА”**

Подсекция
“МОЛЕКУЛЯРНАЯ ФИЗИКА”,

Сборник тезисов докладов

МОСКВА
Физический факультет МГУ
2023

$\gamma \sim 10^{12}$ К/с. Однако, максимальные скорости охлаждения, реализуемые в эксперименте на данный момент, как правило, не превышают $\gamma \sim 10^7$ К/с [2]. Моделирование глубокого переохлаждения системы $N \sim 10^4$ частиц при таких значениях γ будет длиться месяцы и годы. Следовательно, разработка методов, позволяющих моделировать многочастичную систему в экспериментально реализуемых условиях, является актуальной задачей. Решение этой задачи позволит интерпретировать реальные эксперименты по фазовым переходам с помощью методов моделирования молекулярной динамики. Цель данной работы заключалась в развитии оригинальной методики моделирования охлаждения расплавов со скоростями, приближенными к экспериментально реализуемым.

Рассматривается система из $N = 1372$ частиц, взаимодействие между которыми описывается потенциалом Леннарда-Джонса [1]:

$$U(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где r_{ij} – расстояние между частицами i и j . Температура системы меняется в диапазоне от $T_1 = 1.3\epsilon/k_B$ до $T_2 = 10^{-4}\epsilon/k_B$. Плотность системы $\rho \approx 0.75\sigma^{-3}$ поддерживается постоянной. Интегрирование уравнений движения осуществляется с помощью скоростного алгоритма Верле [3] с временным шагом $\Delta t = 0.005\tau = 0.005\sigma(m/\epsilon)^{1/2}$, где m – масса частицы. Скорость охлаждения γ принимает значение $\gamma = 4 \cdot 10^{-4}\epsilon/k_B\tau \sim 10^{10}$ К/с.

На примере системы Леннарда-Джонса показано, что оригинальная методика позволяет восстановить интересные состояния системы с заданной температурой T_2 , идентичные получаемым при охлаждении с произвольно заданными скоростями, начиная с температуры T_1 , не прибегая к моделированию такого охлаждения на всём диапазоне температур $[T_1; T_2]$.

Работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 20-1-2-38).

Литература

1. Jones J.E. On the Determination of Molecular Fields. I. From the Variation of the Viscosity of a Gas with Temperature // Proceedings of the Royal Society A. 1924. Vol. 106. P. 441.
2. Ryltsev R.E. et al. Cooling rate dependence of simulated $\text{Cu}_{64.5}\text{Zr}_{35.5}$ metallic glass structure // The Journal of Chemical Physics. 2016. Vol. 145. P. 034506.
3. Swope W.C. et al. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters // The Journal of Chemical Physics. 1982. Vol. 76. P. 637.

ПРОЦЕССЫ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В ФУЛЛЕРЕНОВЫХ СМЕСЯХ

Хайруллина Р.Р.,¹ Хуснутдинов Р.М.^{1,2}

¹Казанский (Приволжский) ФУ, институт физики, Казань, Россия

²Удмуртский ФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

E-mail: raniya-art@mail.ru

Заметным событием XX века в области химии углерода стало открытие новой аллотропной модификации углерода – фуллеренов [2]. Фуллерены – это устойчивые молекулярные формы углерода, которые состоят из 20 и более углеродных атомов [1]. В последнее время большое число работ посвящено изучению свойств конденсированных однокомпонентных фуллереновых систем – фуллеритов C_n ($n \in [20, 720]$). Наиболее изученными системами являются фуллерены, состоящие из молекул C_{60} и C_{70} [1,2]. К настоящему времени исследования конденсированных фаз высших фуллеренов и их смесей затруднены сложностью их получения [3,4]. В последнее время особый интерес у исследователей вызывает изучение полиаморфных переходов в однокомпонентных и бинарных фуллереновых системах, которые происходят при изменении термодинамических параметров: температуры, давления, а также при облучении [1-4]. В отличие от

полиморфных превращений в кристаллических системах, в которых переходы обусловлены прежде всего изменением удельного объема и энтропии, полиаморфные переходы связаны в первую очередь с изменением ближнего структурного порядка (типа связи, координации ближайших соседей и т.п.).

В настоящей работе исследуются локальные структурные особенности переохлажденного расплава фуллереновой смеси $A_{20}B_{80}$ (где $A=C_{60}$ и $B=C_{70}$), полученного при различных скоростях охлаждения системы с целью выяснения механизма формирования икосаэдрического ближнего порядка в бинарных молекулярных жидкостях. Анализ ближнего структурного порядка расплава фуллереновой смеси выполнен с помощью крупномасштабного молекулярно-динамического моделирования с последующим структурным и кластерным анализом. Были рассчитаны температура кристаллизации и критическая температура стеклования системы, которые составили соответственно $T_m \approx 1439$ К и $T_c \approx 1238$ К. Установлено, что кристаллизация фуллереновой смеси, при достаточно высоких скоростях охлаждения ($\gamma = [10^{10}; 10^{12}]$ К/с), протекает по поликристаллическому сценарию с образованием кластеров с ГЦК и ГПУ симметриями. В рамках метода многогранников Вороного, обнаружено, что в переохлажденной фуллереновой смеси ближний икосаэдрический порядок образован незначительным количеством идеальных икосаэдрических кластеров ($\sim 2.4\%$) и некоторым набором искаженных икосаэдрических кластеров ($\sim 17\%$). Показано, что при температурах ниже критической температуры стеклования доля икосаэдрических кластеров в системе практически не изменяется.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22-22-00508).

Литература

1. Агафонов С.С. и др. Полиаморфный переход в аморфных фуллеритах // ФТТ. 2010. Т. 52. №6. С. 1245.
2. Бражкин В.В. и др. Новые кристаллические и аморфные модификации углерода, полученные из фуллерита при высоком давлении // УФН. 1997. Т. 167. С. 1019.
3. Бражкин В.В., Ляпин А.Г. Превращения фуллерита C_{60} при высоких давлениях и температурах // УФН. 1996. Т. 166. С. 893.
4. Елецкий А.В., Смирнов Б.М. Фуллерены и структуры углерода // УФН. 1995. Т. 165. С. 977.

СТРУКТУРА ТОНКИХ ГРАНИЧНЫХ СЛОЕВ ЖИДКОСТИ ВБЛИЗИ ТВЕРДОЙ ОГРАНИЧИВАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ

Халаимов Д.В.

Иркутский ГУ, физический факультет, Иркутск, Россия

E-mail: thv.mail.ru@yandex.ru

Изучение ближнего порядка в жидкостях вблизи твердой ограничивающей поверхности является важной задачей классической статистической физики сильно взаимодействующих частиц.

Ближний порядок определяется одночастичной и двухчастичной функцией распределения, которые находятся решением системы двух нелинейных интегральных уравнений [1]. Ядра уравнений представлены бесконечными функциональными рядами от этих же функций.

В работе [2] было показано, что систему двух нелинейных интегральных уравнений можно свернуть к интегральному уравнению Фредгольма второго рода, ядро и правая часть которого определяются граничным условием перехода к однородной жидкости вдали от поверхности [3].

Мы рассматриваем решение уравнений [4] для молекулярной системы твердых сфер вблизи твердой поверхности.