

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

© 2005, Мигаль Л.В., Бондарев В.Г.

СТОХАСТИЧЕСКАЯ УПАКОВКА СИСТЕМ СФЕРИЧЕСКИХ МОНОЧАСТИЦ НА ПЛОСКОСТИ

Введение Изучение стохастических упаковок твердых частиц представляет большой интерес и для моделей структуры гранулированных сред, жидкостей, биологических клеток, стекол [1,2]. Одной из наиболее актуальных проблем теории плотноупакованных систем является оценка предельных значений плотностей упаковки частиц, расположенных случайным образом, в пространстве размерности R^2 [3]. Наиболее значимые результаты по определению плотности стохастических упаковок были получены путем физического и компьютерного моделирования. Однако полученные результаты дают значения интегральной плотности упаковки, лежащие в довольно широком диапазоне, от 0,80 до 0,84 [4,5]. Наличие такого разброса данных по плотности упаковки не позволяет выявить наличие существования двух видов плотноупакованных систем: свободной и связанной, которые имеют место в трехмерных упаковках [6]. Именно поэтому, основной целью настоящей работы явилось применение математического и имитационного моделирования к стохастической упаковке системы сферических частиц в двумерном пространстве, с целью выявления возможности существования как свободной, так и связанной упаковок, а также оценки предельных значений структурных характеристик плотноупакованной системы частиц.

Математическая модель. В основу математической модели формирования плотноупакованной системы сферических монокластиков положены следующие допущения.

– частицы системы представляют собой двумерные сферы единичного радиуса, которые являются абсолютно жесткими и взаимодействуют друг с другом только контактным способом;

– область размещения системы частиц имеет «прозрачные» границы, не влияющие на расположение частиц в упаковке

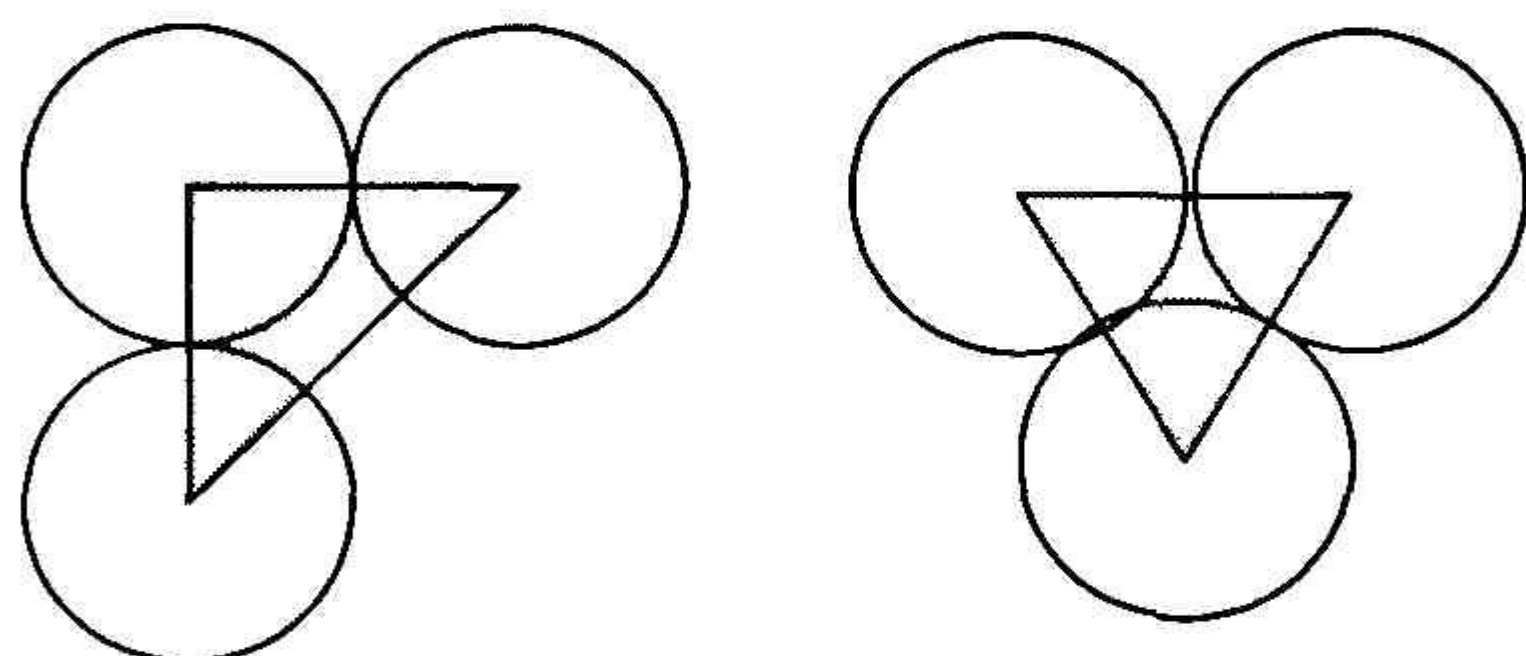


Рис.1. Регулярные структурные элементы.

Для решения поставленной задачи нами был предложен принцип построения стохастической упаковки систем сферических частиц, в котором структуру упаковки можно описать как совокупность структурных элементов регулярных упаковок. При построении математической модели случайной упаковки рассматривалась модель структуры, сформированной много-

кратным повторением базовых конфигураций (рис.1), образованных на основе регулярных структурных элементов, имеющих форму в виде прямоугольного и равностороннего треугольника

Предполагалось, что изменение плотности упаковки определяется только взаимным расположением структурных элементов при сохранении их формы. Основным параметром структурных элементов является их некоторый условный линейный размер, соответствующий размеру диаметра σ частицы. Каждый структурный элемент образован тремя частицами.

Анализ базовых конфигураций, образованных на основе регулярных структурных элементов, показал, что возможно сформировать всего семь различных типов конфигураций (рис. 2).

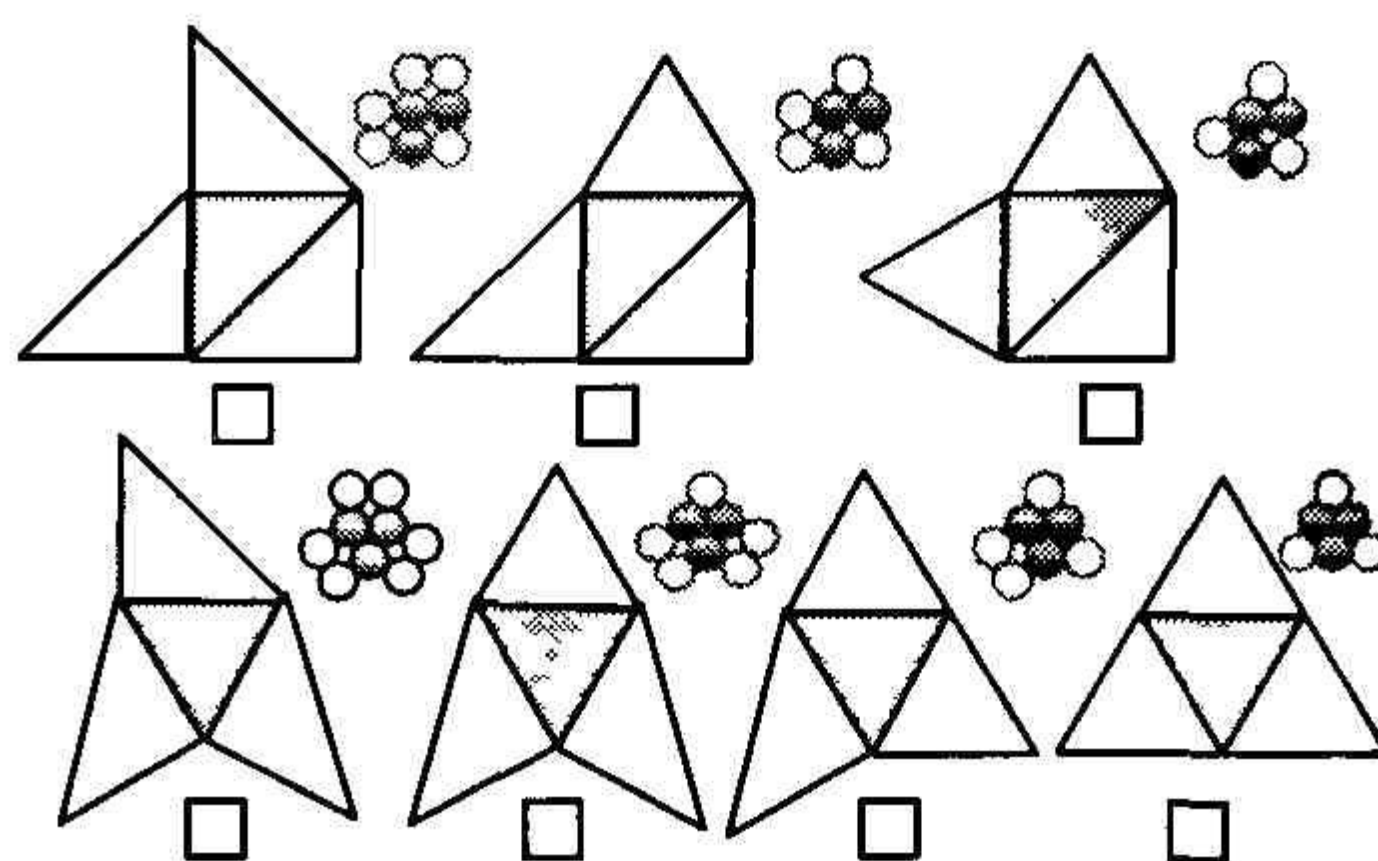


Рис. 2. Типы базовых конфигураций.

Каждая из представленных конфигураций обладает собственными наборами структурных характеристик. В табл. 1 приведены численные оценки для значений площадей и плотностей упаковки различных типов конфигураций.

Таблица 1

Оценки значений средних площадей элементов и плотностей упаковки различных типов конфигураций в системе двумерных моносфер

ТИП	1	2	3	4	5	6	7
Площадь элемента	0,500	0,4866	0,4665	0,4904	0,4776	0,4598	0,4330
Плотность упаковки	0,7854	0,8070	0,8418	0,8007	0,8221	0,8541	0,9069

Плотность связанной упаковки определялась путем расчета средней площади, приходящейся на одну частицу по формуле

$$\varphi_{\text{связ}} = \frac{n s_p}{\sum_i s_i} \quad (1)$$

где: n – число конфигураций; s_p – площадь частицы; s_i – средняя площадь, занимаемая частицей в i -той конфигурации.

Расчет по формуле (1) приводит к численной оценке плотности связанной упаковки: $\varphi_{связ} = 0,8295$.

Плотность свободной упаковки рассчитывалась на основе только двух предельных базовых конфигураций

$$\varphi_{своб} = \frac{3s_p}{2s_1 + s_7} \quad (2)$$

Здесь, при определении свободной плотности упаковки, учитывается тот факт, что число прямоугольных структурных элементов в упаковке должно быть в два раза большим, по сравнению с количеством равносторонних структурных элементов, что связано с обязательной установкой возле каждого прямоугольного аналогичного структурного элемента. Расчет по формуле (2) приводит к численной оценке плотности свободной упаковки: $\varphi_{своб} = 0,8221$. Сравнение численных значений свободной и связанной плотностей упаковки показывает, что разница этих значений находится в пределах погрешности экспериментального определения данных характеристик.

Экспериментальная проверка. Для проверки достоверности предложенной математической модели методом Монте-Карло моделировались стохастические упаковки, состоящие из двумерных монофер, находящиеся как в свободном, так и в связанном состояниях. На выходе производился расчет данных локальной и интегральной плотностей упаковки, а также значений координационных чисел. Кроме того, фиксировались координаты центров частиц и рассчитывались межчастичные расстояния. Имитационное моделирование проводилось методом послойной упаковки [6] на области установки частиц системы размером $50 \times 50 \sigma$ (σ – диаметр частицы), позволяя расположить в данной области более 3000 дисков в каждой конфигурации, при исключении граничных условий.

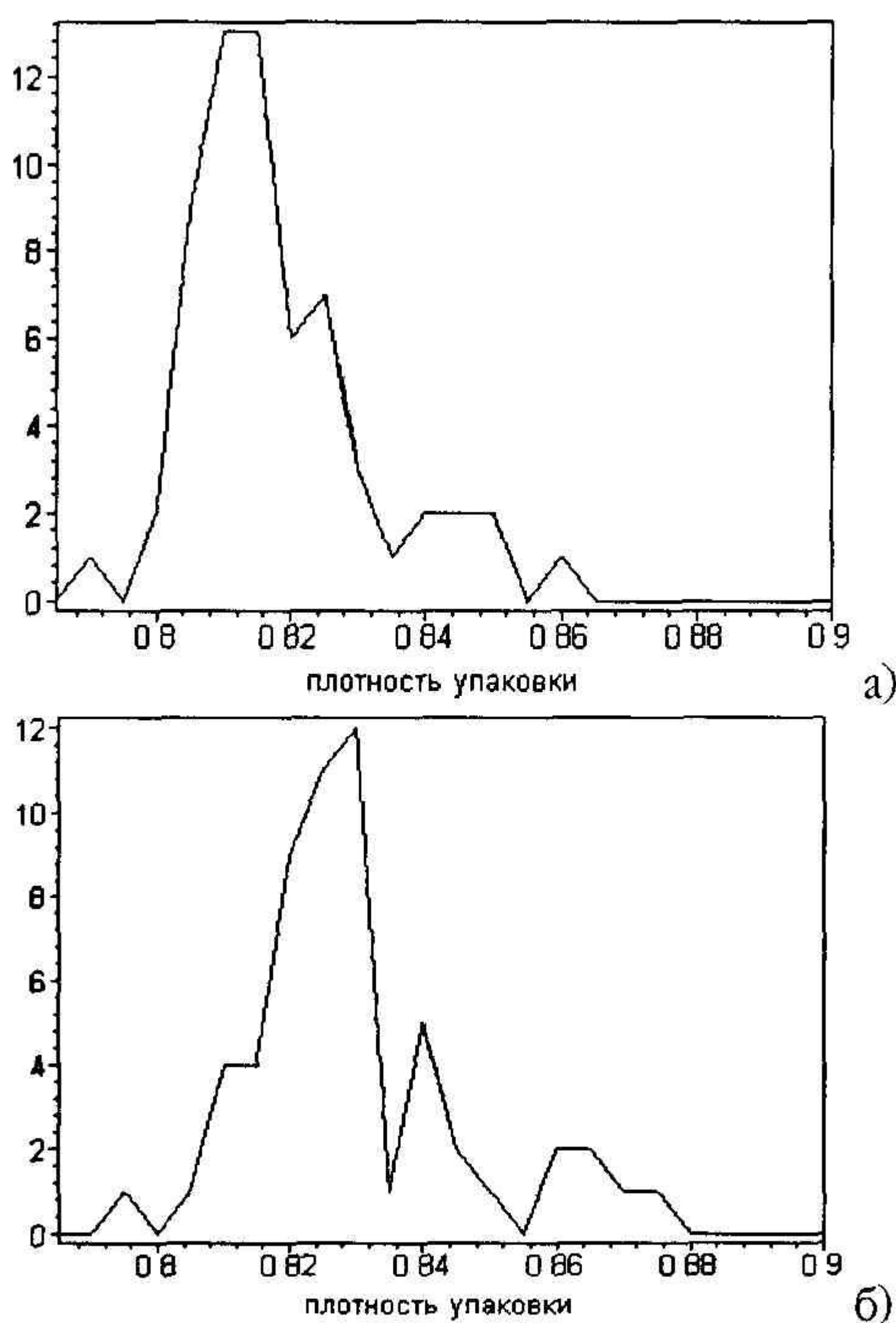


Рис. 3. Кривые распределения локальных плотностей упаковки системы двумерных монофер в свободном (а) и связанном (б) состояниях.

Для максимального приближения к предложенной математической модели первоначально были проведены эксперименты по формированию псевдослучайных упаковок, образованных на основе регулярных структурных элементов. Для каждого из состояний было построено по 70 упаковок. Статистическая оценка интегральной плотности упаковки приводит к среднему значению $\varphi_{связ} = 0,82951 \pm 0,003$ для связанной упаковки и к значению $\varphi_{своб} = 0,82159 \pm 0,004$ – для свободной упаковки. Полученные данные по оценке интегральных плотностей упаковки, в пределах погрешности измерения, с достаточно хорошей точностью совпадают с результатами математического моделирования стохастических упаковок.

Также были проведены эксперименты по формированию стохастических упаковок. На рис. 3 показаны, соответствующие проведенному эксперименту, данные о распределении локальной плотности упаковки $\varphi_{лок}$, рассчитанной путем численного моделирования системы монофер для свободной и связанной стохастических упаковок.

Анализ поведения кривых распределения плотности упаковки показывает на наличие ряда пиков, которые соответствуют определенным дискретным значениям плотностей упаковки локальных слоев, независимо от того, в каком состоянии находится стохастическая упаковка (табл. 2).

Таблица 2

Максимальные значения пиков кривых распределения локальных плотностей упаковки системы двумерных монофер

Упаковка	Дискретные плотности упаковки локальных слоев					
	0,79	0,815	0,83	0,845	0,86	-
Свободное состояние	1	13	7	2	1	-
Связанное состояние	0,795	0,815	0,83	0,845	0,86	0,875
	1	4	12	5	2	1

Как видно из табл. 2 различие в значениях интегральной плотности упаковки для различных состояний может быть связано, в основном, с величиной предельных пиков на кривых распределения локальной плотности упаковки. Кроме того, имеется некоторое различие в появлении пика в диапазоне значений локальных плотностей упаковки 0,84-0,85. Однако на аналогичных графиках в ряде других испытаний данные пики практически полностью соответствовали друг другу. В тоже время на кривой для свободной упаковки также имеется некоторая нечеткость ряда пиков. В случае связанной упаковки нечеткость пиков носит менее выраженный характер.

Сопоставление максимальных значений пиков кривых распределения локальных плотностей упаковки показывает, что основное отличие свободной упаковки от связанной заключается в смещении глобального максимума с пика, имеющего плотность упаковки 0,815 на пик с плотностью упаковки 0,83. Также имеется ряд отличий в положении крайних пиков. Так, наблюдается небольшое смещение первого пика в сторону увеличения плотности упаковки для связанной упаковки. Кроме того, возникает дополнительный пик на правой границе для данной упаковки, имеющий значение локальной плотности упаковки равное 0,875. Статистическая оценка интегральной плотности стохастической упаковки приводит к несколько заниженным значениям по отношению к полученным в процессе математического моделирования. Так, среднее значение интегральной плотности стохастической

упаковки $\varphi_{связ} = 0,824 \pm 0,010$ в связанном состоянии, и к значению $\varphi_{своб} = 0,819 \pm 0,014$ – в свободном состоянии. Сопоставление полученных путем имитационного моделирования данных с теоретическими значениями по определению интегральной плотности стохастической упаковки также показывает на правильность выбранного подхода при проведении математического моделирования стохастической упаковки систем сферических моночастиц в пространстве R^2 .

На рисунке 4 приведены данные о распределении координационных чисел, рассчитанные путем имитационного моделирования также для свободной и связанной стохастических упаковок.

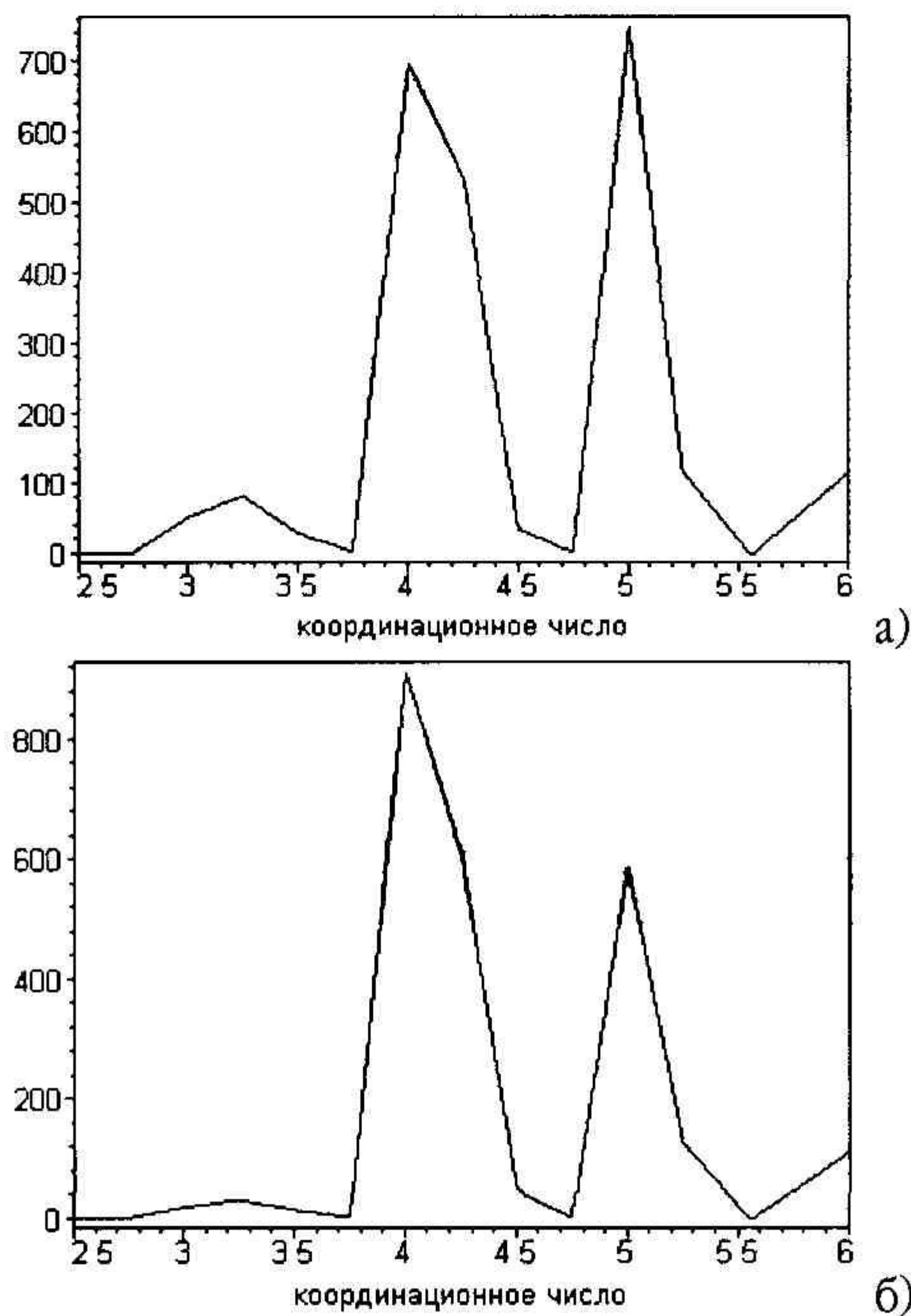


Рис. 4. Распределение координационных чисел системы двумерных моносфер в свободном (а) и связанном (б) состояниях

Координационное число рассчитывалось по предложенной авторами формуле, основанной на выборе

экспоненциального закона распределения, близкому к пуассоновскому:

$$z = \sum_{i=1}^m e^{-A(r-a)/a}, \quad (3)$$

где r_i – расстояния между основной и другими частицами; a – диаметр частицы; m – число частиц, входящих в область первой координационной сферы.

Граничным значением для первого координационного слоя выбиралось расстояние число равно радиусу второй координационной сферы в квадратной регулярной упаковке. Коэффициент A подбирался эмпирически, путем получения значения координационного числа для частиц второй координационной сферы близким к нулю ($A=12$).

Результаты моделирования показали, что поведение кривых распределения координационного числа носит существенно дискретный характер. Причем, пики строго соответствуют конкретным целым значениям координационного числа, за исключением первого пика, где максимум достигается при значении: $z=3,3$. Смещение значения координационного числа для свободной упаковки практически полностью связано с количеством частиц имеющих низкие координационные числа. При этом, в свободной упаковке обнаружено некоторое увеличение количества частиц, имеющих максимальное координационное число, однако данный эффект не играет существенной роли при оценке средней величины координационного числа стохастической упаковки, находящейся в разных состояниях. Статистическая оценка координационных чисел приводит к среднему значению $z_{связ} = 4,91 \pm 0,26$ для связанной упаковки и к значению $z_{своб} = 4,41 \pm 0,12$ – для свободной упаковки.

Проведенные исследования по стохастической упаковке твердых моносфер, путем имитационного моделирования, позволили проанализировать процессы формирования плотноупакованных систем частиц в двумерном пространстве. Одним из наиболее интересных результатов данного исследования, можно считать экспериментальное подтверждение возможности нахождения стохастической упаковки в свободном и связанном состояниях. Полученные кривые распределения локальных плотностей упаковки и координационных чисел позволяют объяснить причину существования двух данных состояний.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kansal A.R., Truskett T.M., Torquato S. Nonequilibrium hard-disk packings with controlled orientational order. //J.Chem.Phys. – 2000, vol.113, No.12. – p.4844-4851.
2. Berryman J.G., Random close packing of hard-spheres and disks. //Phys. Rev. A – 1983, vol.27. – p.1053-1061.
3. Kausch H.H., Fesko D.G., Tschoegl N.W. The random packing of circles in a plane //J. of Colloid and Interface Sci., – 1971, vol.37, No.3. – p.603-611.
4. Tory E.M., Church B.H., Tam M.K., Ratner M. Simulated random packing of equal spheres. //Can. J. Chem. Eng. – 1973, vol.51. – p. 484-493.
5. Алиевский Д.М. Геометрическое моделирование плотных упаковок. / И.Г.Каменин, Р.М.Кадушников //Реологические модели и процессы. Межд. семинар, Екатеринбург, 1997. – с. 64-65.
6. Бондарев В.Г. Моделирование случайной упаковки системы сферических частиц в пространстве R^2 . / Л.В.Мигаль //Компьютерные технологии в науке. Межд. научн. практ. конф., Новочеркасск 2003. – с.7-8.

© 2005, Сафаралиев Г.К., Билалов Б.А., Кузнецов Г.Д., Курбанов М.К.

СИНТЕЗ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ МАГНЕТРОННЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ СОСТАВНЫХ МИШЕНЕЙ

Введение. Широкозонные полупроводники твердых растворов на основе карбида кремния являются весьма перспективными материалами для создания приборов с повышенной стойкостью к различным внешним воздействиям (тепловому, механическому,

радиационному). Псевдобинарные твердые растворы $(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ позволяют существенно расширить диапазон важнейших электрофизических свойств карбида кремния и создавать оптоэлектронные приборы для