

Г. В. Емельянов, Е. И. Герман, Ш. Б. Цыдыпов, Д. В. Доргеева, С. Е. Цыденова.
Исследование переходов жидкость-кристалл и жидкость-стекло ...

Научная статья

УДК 51.7

DOI: 10.18101/2304-5728-2025-4-75-85

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕХОДОВ ЖИДКОСТЬ-КРИСТАЛЛ И ЖИДКОСТЬ-СТЕКЛО НА МОДЕЛЯХ КСЕНОНА

© Емельянов Григорий Вячеславович

аспирант,

Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

n3verlucky@gmail.com

© Герман Евгений Иванович

старший преподаватель,

Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

net-admin@list.ru

© Цыдыпов Шулун Балдоржиевич

доктор технических наук, доцент,

Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

shulun@bsu.ru

© Доргеева Диана Владимировна

магистрант,

Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

dorgeevadians@gmail.com

© Цыденова Саяна Евгеньевна

магистрант,

Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

tssayana2001@gmail.com

Аннотация. В работе представлены результаты компьютерного моделирования процессов охлаждения систем частиц ксенона при различных термодинамических параметрах. Исследование фокусируется на выявлении взаимосвязи между условиями охлаждения (скорость изменения температуры и приложенное давление) и структурными характеристиками образующихся твёрдых фаз.

В ходе моделирования варьировались два ключевых параметра: скорость охлаждения — рассмотрены три порядка величин: 10^8 , 10^9 и 10^{10} К/с; давление — исследованы значения 0.5, 1.0, 2.0 и 4.0 МПа.

Основной научный результат работы заключается в установлении чёткой зависимости типа образующейся структуры от кинетических и термодинамических условий процесса. Показано, что при высоких скоростях охлаждения (порядка 10^{10} К/с) формируется стеклообразное твёрдое тело — неупорядоченная структура, в которой частицы «замораживаются» в положении, характерном для жидкого состояния, не успевая выстроить кристаллическую решётку; при меньших скоростях охлаждения ($10^8 - 10^9$ К/с) происходит образование систем с явными структурными признаками кристалла — упорядоченной решёткой, характерной для твёрдого состояния. Кроме того, исследование продемонстрировало существенное влияние давления на структурные особенности получаемых твёрдых фаз. Изменение давления от 0.5 до 4.0 МПа модифицирует параметры образующейся кристаллической решётки, влияя на межатомные расстояния и координацию частиц.

Ключевые слова: ксенон, жидкость, твёрдое тело, изобара, стеклообразное состояние, кристаллическая решётка, функции распределения частиц, структура аморфного тела, аморфное тело, фазовая диаграмма.

Для цитирования

Исследование переходов жидкость-кристалл и жидкость-стекло на моделях ксенона / Г. В. Емельянов, Е. И. Герман, Ш. Б. Цыдытов [и др.] // Вестник Бурятского государственного университета. Математика, информатика. 2025. № 4. С. 75–85.

Введение

С помощью существующих методов численного моделирования имеется возможность изучения процессов кристаллизации и перехода систем в аморфное стеклообразное состояние, что, в свою очередь, открывает возможность для наблюдения структурных особенностей корреляционных функций.

В ходе проведения исследований на моделях простых веществ со сферически симметричным потенциалом взаимодействия с помощью метода молекулярной динамики были исследованы температурные зависимости теплофизических свойств этих веществ при различных скоростях охлаждения вдоль различных изобарных линий. В результате этих численных экспериментов было показано, что при больших скоростях охлаждения система частиц не совершает фазовый переход первого рода «жидкость-кристалл» при достижении температуры кристаллизации для данного давления. При дальнейшем охлаждении эта система, сохраняя свою структуру жидкости, переходит в твердое стеклообразное состояние, одним из признаков которого является расщепление второго максимума радиальной функции распределения [1–3].

Данный переход жидкость-стекло не является фазовым переходом и, скорее всего, является кинетическим явлением, так как зависит от скорости охлаждения [2] и скорости структурной перестройки кинетических единиц [4], в связи с чем граница перехода определяется условиями проведения эксперимента [5; 6]. При достаточно большой скорости охлаждения частицы моделируемой системы не могут образовать кристаллическую

скую структуру из-за недостаточного пространства для их перемещения в узлы кристаллической решетки. В результате чего структура жидкости медленно меняется в сторону структуры кристалла, что описывается крайне длительными временами релаксации.

В настоящей работе для описания структурных особенностей системы используется функция радиального распределения частиц $g(r)$:

$$g(r) = \frac{1}{4\pi * r^2 dr} \frac{dN}{n}. \quad (1)$$

Здесь $4\pi r^2 dr$ — объем dV сферического слоя толщиной dr на расстоянии r от произвольно выбранной частицы, $n = N / V$ — средняя плотность числа частиц.

Радиальная функция распределения $g(r)$ характеризует наличие ближнего порядка, так как является отношением локальной плотности числа частиц dN / dV в сферическом слое толщиной dr на расстоянии r от произвольно выбранной частицы к средней плотности числа частиц [2; 7]. При отсутствии ближнего порядка в структуре системы частиц локальная плотность числа частиц стремится к средней плотности системы и функция $g(r)$ стремится к единице.

Кроме этого, функция радиального распределения связана со многими термодинамическими параметрами вещества [2].

Методика моделирования

Исследования проводились путём проведения компьютерных экспериментов с использованием метода молекулярной динамики [8].

В качестве объекта исследования была выбрана система частиц из атомов ксенона. В качестве потенциала парного взаимодействия частиц ксенона выбран известный потенциал Леннарда — Джонса [7; 9]. Параметры этого потенциала для ксенона: глубина потенциальной ямы $\varepsilon / k_B = 232$ К (где k_B — постоянная Больцмана), эффективный диаметр $\sigma = 3.98 * 10^{-10}$ м.

$$U(r) = 4\varepsilon \left(\left[\frac{\sigma}{r} \right]^{12} - \left[\frac{\sigma}{r} \right]^6 \right). \quad (2)$$

Начальное состояние систем инициировалось при температуре $T_1 = 218$ К для давления 0.5 МПа, $T_2 = 237$ К для давления 1.0 МПа, $T_3 = 257$ К для давления 2.0 МПа, $T_4 = 316$ К для давления 4.0 МПа, что в соответствии с фазовой диаграммой ксенона (рис. 1) отвечало нахождению систем в газовом состоянии.

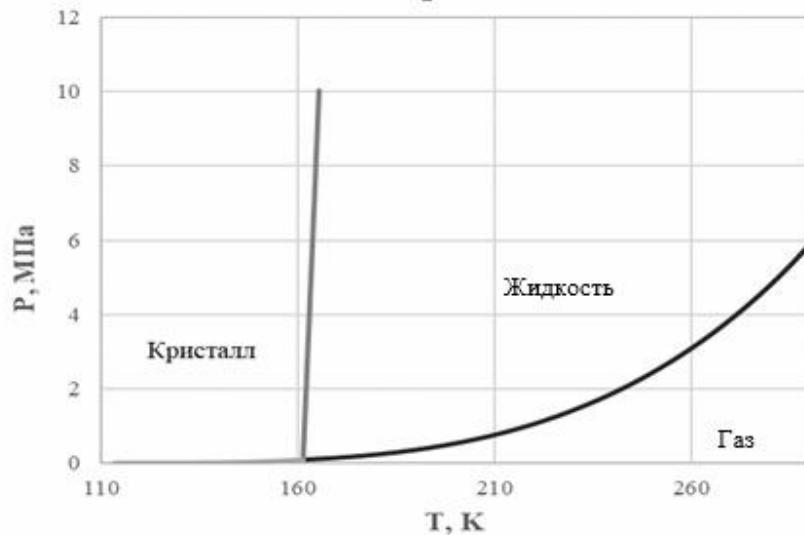


Рис. 1. Фазовая диаграмма ксенона в РТ координатах¹

При компьютерном моделировании с использованием методов молекулярной динамики приведенная температура системы понижалась таким образом, чтобы обеспечивалась постоянная скорость охлаждения системы от начальной температуры (имеющей различные значения для разных экспериментов) до конечной температуры. Моделирование проводилось на скоростях изменения температуры 10^8 , 10^9 , 10^{10} К/с до достижения температуры 40 К [2], приложенное давление составляло 0.5, 1.0, 2.0, 4.0 МПа. При таком охлаждении системы миновали температуры кипения и кристаллизации и в конечном итоге достигали твердого состояния.

Обсуждение результатов

Проведённое компьютерное моделирование изобарного охлаждения систем частиц ксенона при различных скоростях охлаждения и давлениях продемонстрировало значительное влияние на структуру образующихся твердых фаз регулируемых параметров охлаждения, таких как поддерживаемое давление и динамика изменения температуры. Анализ полученных при моделировании изобар выявил чёткую зависимость, представленную на рис. 2. При скорости охлаждения 10^8 К/с на изобаре наблюдается два выраженных скачка, интерпретируемых как фазовые переходы «газ-жидкость» и «жидкость-кристалл» [11]. В противоположность к этому

1. Xenon | Gas Encyclopedia Air Liquide. URL:
<https://encyclopedia.airliquide.com/xenon#properties> (date of access: 09.11.2025).

при охлаждении со скоростью 10^9 и 10^{10} К/с второй скачок, соответствующий кристаллизации, не наблюдается. Это позволяет сделать вывод о том, что при скорости, равной или большей 10^9 К/с, не происходит полной кристаллизации ксенона.

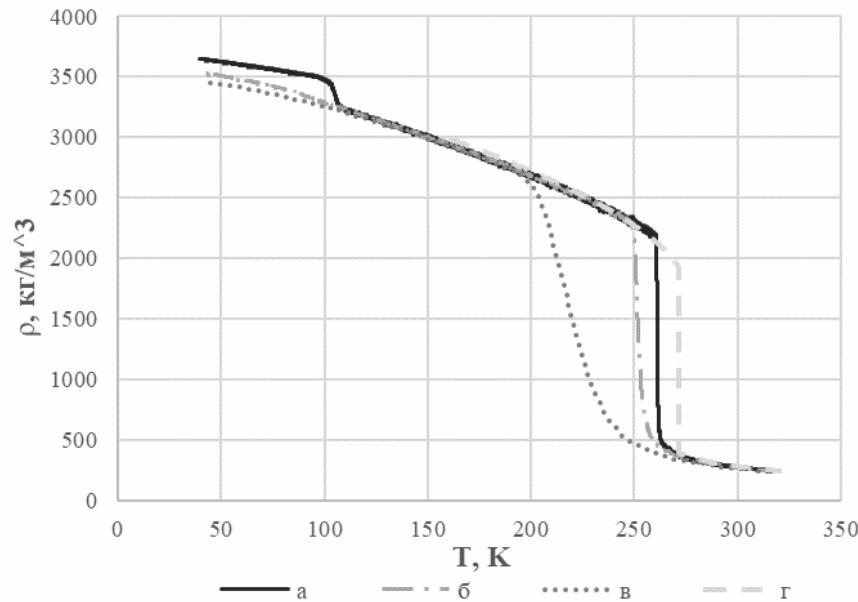


Рис. 2. Зависимость плотности системы частиц ксенона от температуры в результате моделирования изобарного (4 МПа) охлаждения:
а) со скоростью 10^8 К/с; б) со скоростью 10^9 К/с;
в) со скоростью 10^{10} К/с; г) литературные данные [11]

На основании данных, полученных в ходе моделирования охлаждения систем частиц ксенона на различных скоростях, был выполнен расчет теплоемкости для систем, охлаждаемых со скоростью 10^8 , 10^9 К/с при постоянном давлении [2] 2.0 МПа. Результаты выполнения расчёта представлены на рис. 3.

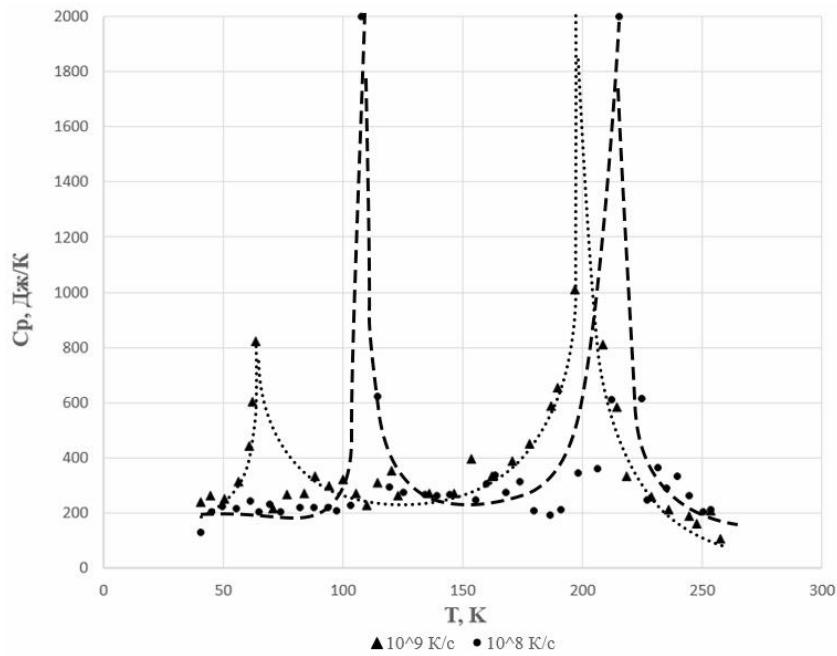


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости ксенона при скоростях охлаждения 10^8 и 10^9 К/с при постоянном давлении 2 МПа.

Результаты расчётов, представленные на рис. 3, отчетливо фиксируют точки фазовых переходов «газ-жидкость» и «жидкость-твердое тело».

Таблица 1

Скорость охлаждения, К/с	Тип перехода	Температура перехода, К
10^8	«газ-жидкость»	215
	«жидкость-твердое тело»	107
10^9	«газ-жидкость»	205
	«жидкость-твердое тело»	63

Как видно из таблицы 1, при скорости охлаждения 10^8 К/с система частиц ксенона испытывает фазовые переходы [10] «газ-жидкость» при температуре 215 К и «жидкость-твердое тело» при температуре 107 К. Фазовый переход, наблюдаемый при температуре 107 К, может быть трактован как фазовый переход первого рода «жидкость-криSTALL».

При более быстром охлаждении со скоростью 10^9 К/с наблюдаются фазовые переходы «газ-жидкость» при температуре 205 К и «жидкость-твердое тело» при температуре 63 К. Второй фазовый переход при температуре 63 К можно интерпретировать как переход в метастабильное стеклообразное состояние, обусловленное кинетическими ограничениями, не позволяющими частицам занять положения в узлах кристаллической решетки.

Структурный анализ, выполненный с помощью расчета радиальных функций распределения (РФР) моделируемых систем, охлажденных до температуры 40 К, подтвердил выдвинутые ранее предположения. Для систем, охлажденных со скоростью 10^8 К/с и приложенном давлении 0.5, 1.0, 2.0, 4.0 МПа, на графиках РФР (рис. 4) наблюдаются резкие узкие пики, являющиеся признаком формирования гранецентрированной кристаллической решетки. С возрастанием расстояния в радиальных функциях распределения также наблюдается размытие кристаллической структуры [2]. При этом повышение давления в системе в ходе охлаждения способствует увеличению степени структурного порядка, что проявляется в усилении и большей выраженности максимумов на графиках РФР.

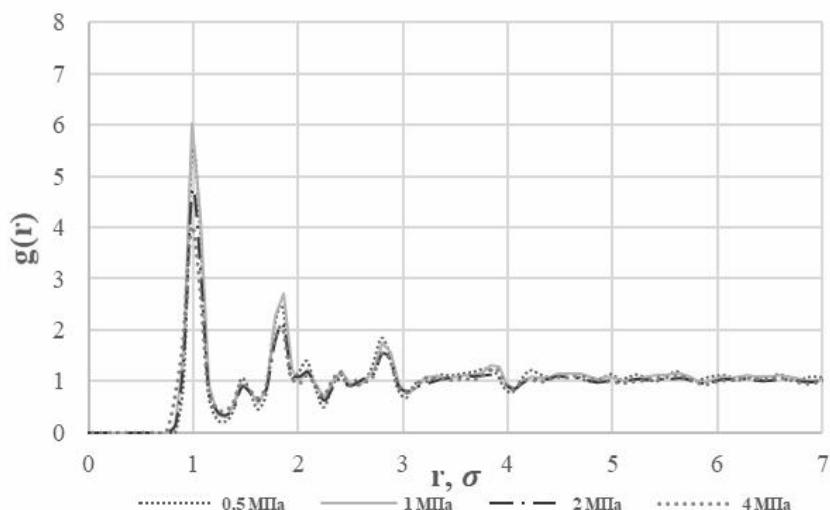


Рис. 4. Радиальные функции распределения частиц ксенона при температуре 40 К, полученные в результате охлаждения со скоростью 10^8 К/с.

На графиках радиальных функций систем, образованных в результате охлаждения со скоростью 10^9 К/с (рис. 5), также наблюдаются пики, характерные дислокации частиц в узлах кристаллической решетки, но в сравнении с результатами, полученными при охлаждении системы со скоростью 10^8 К/с, эти максимумы значительно размыты. Более существенно проявляется влияние приложенного давления на структуру образованного твердого тела. Так, в результате охлаждения со скоростью 10^9 К/с при давлении 0.5 МПа на радиальной функции вместо ярко выраженных пиков наблюдается несколько расщеплений в окрестностях второй координационной сферы [2].

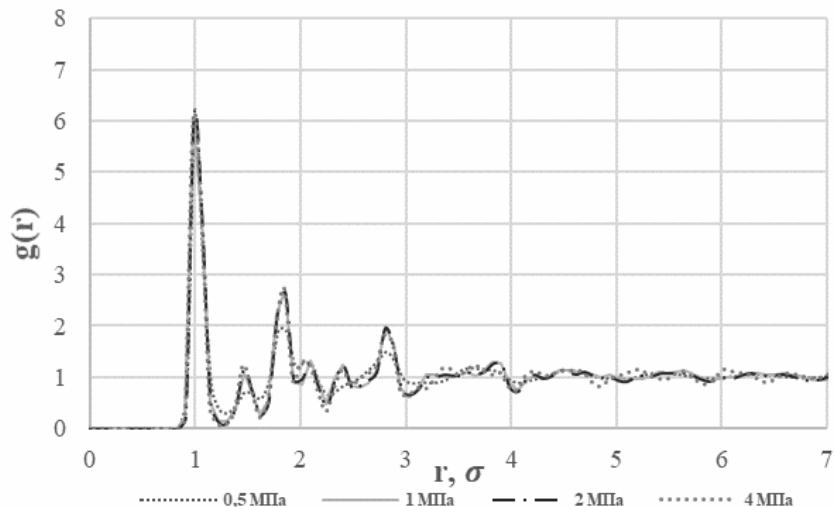


Рис. 5. Радиальные функции распределения частиц ксенона при температуре 40 К, полученные в результате охлаждения со скоростью 10^9 К/с.

При охлаждении со скоростью, равной 10^{10} К/с, были получены наиболее неупорядоченные конфигурации. Радиальные функции распределения имеют ярко выраженный затухающий осциллирующий характер. Ключевым маркером стеклообразного состояния является отчетливое расщепление второго максимума РФР, что соответствует теоретическим представлениям о структуре аморфных тел [2]. Влияние давления в данном режиме охлаждения становится минимальным, поскольку кинетические ограничения доминируют над термодинамическими факторами, препятствуя структурной реорганизации.

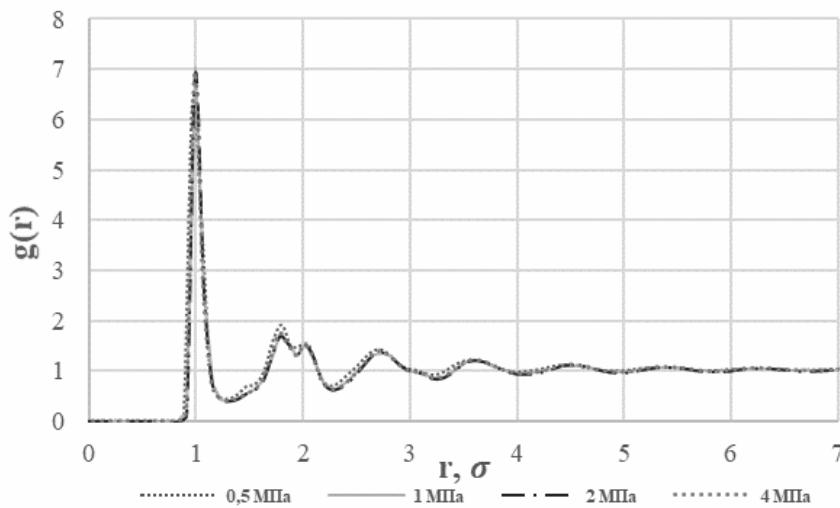


Рис. 6. Радиальные функции распределения частиц ксенона при температуре 40 К, полученные в результате охлаждения со скоростью 10^{10} К/с.

Заключение

Моделирование методом молекулярной динамики процесса охлаждения систем частиц ксенона с различными скоростями в изобарном процессе показывает, что фазовые переходы «газ-жидкость», «жидкость-кристалл» [12] и переход «жидкость-стекло» с характерными изменениями температурных зависимостей плотности и теплоемкости существенно зависят от скорости охлаждения. Полученные в ходе компьютерного моделирования зависимости плотности, температуры и объема совпадают с данными реального эксперимента [13; 14]. Полученные в результате экспериментов функции радиального распределения частиц позволяют установить зависимость между структурой образованных в результате моделирования охлаждения твердых тел и параметрами охлаждения. Установлено, что в результате охлаждения со скоростью 10^8 К/с модели систем частиц ксенона переходят в состояние с характерными признаками кристаллической структуры, при увеличении скорости охлаждения структура образованных твёрдых тел стремится к неупорядоченному состоянию. Также показано, что величина приложенного в процессе охлаждения давления оказывает эффект при структурной перестройке частиц.

Литература

1. Мартынов Г.А. Классическая статистическая механика. Теория жидкостей. Долгопрудный: Интеллект, 2011. 328 с.
2. Герман Е. И., Цыдыпов Ш. Б. Структура кристаллических и аморфных твердых тел на моделях леннард-джонсовых систем // Вестник Бурятского государственного университета. Химия. Физика. 2018. № 2–3. С. 20–28. DOI: 10.18101/2306-2363-2018-2-3-20-28.
3. Цыдыпов Ш. Б., Герман Е. И., Парфенов В. Н. Моделирование методом молекулярной динамики эволюции структурных характеристик аргона в области стеклования // Физика и химия стекла. 2017. Т. 43, № 1. С. 62–68.
4. Борисова Н. В., Шульц М. М., Ушаков В. М. Стеклование жидкофазных систем: конфигурационная энтропия и масштаб кооперативного движения // Информационный бюллетень РФФИ. 1998. Т. 6, № 3. С. 502.
5. Гетце В. Фазовые переходы жидкость — стекло. Москва: Наука, 1992. 152 с.
6. Сандитов Д. С., Цыдыпов Ш. Б., Баинова А. Б. Критерий стеклования жидкостей в модели возбужденных атомов // Журнал физической химии. 2004. Т. 78, № 5. С. 906–911.
7. Саркисов Г. Н. Молекулярные функции распределения стабильных, метастабильных и аморфных классических моделей // Успехи физических наук. 2002. Т. 172, № 6. С. 647–669.
8. Герман Е. И., Цыдыпов Ш. Б., Дармаев М. В. Компьютерные эксперименты и моделирование в молекулярной физике и физике конденсированного состояния: [учебно-методическое пособие по направлению подготовки 03.03.02 Физика]. Улан-Удэ: Изд-во Бурят. гос. ун-та, 2021. 55 с.

9. Локтионов И. К. Термодинамические свойства аргона на основе смешённого потенциала Леннард — Джонса в закритической области // Сборник научно-методических работ: столетию ДонНГУ посвящается / Министерство образования и науки ДНР; Донецкий национальный технический университет. Донецк: Изд-во Донецкого национ. техн. ун-та, 2021. Вып. 12. С. 181–187.
10. Цыдыпов Ш. Б., Герман Е. И., Парфенов В. Н. Моделирование методом молекулярной динамики эволюции структурных характеристик аргона в области стеклования // Физика и химия стекла. 2017. Т. 43, № 1. С. 62–68.
11. Huber M. L. Models for the Viscosity, Thermal Conductivity, and Surface Tension of Selected Pure Fluids as Implemented in REFPROP v10.0, NIST Interagency/Internal Report (NISTIR) - 8209, NIST, Boulder, Colorado, 2018. 271 с. DOI: 10.6028/NIST.IR.8209.
12. Герман Е. И. Теплофизические свойства и структурные характеристики аргона в условиях термобарического воздействия по данным компьютерных экспериментов: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук [Место защиты: ФГБОУ ВО «Восточно-Сибирский государственный университет технологий и управления»; Диссовет Д 212.039.XX (24.2.289.01)]. Улан-Удэ, 2023. 23 с.: ил.
13. Рабинович В. А., Вассерман А. А., Недоступ В. И. Теплофизические свойства неона, аргона, криптона и ксенона. Москва: Изд-во стандартов, 1976. 638 с.
14. Дабаева А. Б., Герман Е. И. Корреляционные функции систем аргона в результате быстрого и медленного изобарного охлаждения // Перспективы развития науки и образования: материалы международной (заочной) научно-практической конференции (Душанбе, Таджикистан, 6 июня 2016 г.) / под общей редакцией А. И. Вострецова. Душанбе: Мир науки, 2016. С. 9–13.

Статья поступила в редакцию 10.11.2025; одобрена после рецензирования 21.11.2025; принята к публикации 26.11.2025.

RESEARCH OF LIQUID-CRYSTAL AND LIQUID-GLASS TRANSITIONS IN XENON MODELS

Grigory V. Emelyanov
Postgraduate Student,
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina str., Ulan-Ude, 670000 Russia

Evgenny I. German
Senior Lecturer,
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina str., Ulan-Ude, 670000 Russia

Shulun B. Tsydypov
Doctor of Technical Sciences, Professor,
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina str., Ulan-Ude, 670000 Russia

Diana V. Dorgeeva

Master's Student,
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina str., Ulan-Ude, 670000 Russia

Sayana E. Tsydenova

Master's Student,
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina str., Ulan-Ude, 670000 Russia

Abstract. The paper presents the results of computer simulation of xenon particle system cooling processes under various thermodynamic parameters. The study focuses on identifying the relationship between cooling conditions (rate of temperature change and applied pressure) and the structural characteristics of the resulting solid phases. During the simulation, two key parameters were varied: cooling rate - three orders of magnitude were considered: 10^8 , 10^9 , and 10^{10} K/s; pressure - values of 0.5, 1.0, 2.0, and 4.0 MPa were investigated. The main scientific result of the work is the establishment of a clear dependence of the type of structure formed on the kinetic and thermodynamic conditions of the process. It has been shown that: at high cooling rates (of the order of 10^{10} K/s), a glass-like solid is formed - a disordered structure in which particles are "frozen" in a position characteristic of the liquid state, without having time to form a crystalline lattice; at lower cooling rates (10^8 - 10^9 K/s), systems with clear structural features of a crystal are formed - an ordered lattice characteristic of the solid state. In addition, the study demonstrated a significant influence of pressure on the structural features of the resulting solid phases. A change in pressure from 0.5 to 4.0 MPa modifies the parameters of the forming crystal lattice, affecting the interatomic distances and particle coordination.

Keywords: xenon, liquid, solid, isobar, glassy state, crystal lattice, particle distribution functions, structure of amorphous solid, amorphous solid, phase diagram.

For citation

Emelyanov G. V., German E. I., Tsypypov Sh. B., Dorgeeva D. V., Tsydenova S. E.
Research of Liquid-Crystal and Liquid-Glass Transitions in Xenon Models // Bulletin
of Buryat State University. Mathematics, Informatics. 2025. N. 4. P. 75–85.

The article was submitted 10.11.2025; approved after reviewing 21.11.2025; accepted for publication 26.11.2025.