
УДК 532.74

СЛУЧАЙНЫЕ АНСАМБЛИ ЧАСТИЦ С ПЕНТАГОНАЛЬНОЙ СИММЕТРИЕЙ: УПЛОТНЕНИЕ И СВОЙСТВА

© 2025 А. Б. Шубин*

Институт металлургии Уральского отделения РАН,
ул. Амундсена, 101, Екатеринбург, 620016

*E-mail: fortran@list.ru

Поступила в редакцию 08.11.2024

После доработки 09.12.2024

Принята к публикации 10.12.2024

В работе исследованы плотности и статистико-геометрические характеристики случайных упаковок правильных пятиугольников на плоскости. Начальный ансамбль генерировали методом случайной последовательной адсорбции (random sequential adsorption, RSA). Предложен алгоритм уплотнения упаковки, который является модификацией способа Любашевского—Стиллинджера (Lubachevsky-Stillinger, LS). Конечный ансамбль получали путем поэтапного увеличения линейных размеров двухмерных частиц при фиксированной плотности квадратного «бокса». Показано, что плотность упаковки конечного ансамбля для данного алгоритма практически не зависит от плотности начального ансамбля (при общем числе частиц порядка 10^4 и более). Максимальная плотность упаковки стартового ансамбля правильных пентагонов, полученная методом RSA, составила 0.54306 ± 0.00220 , что хорошо согласуется с литературным значением 0.54132. Наибольшая (финальная) плотность, достигнутая после уплотнения стартового ансамбля, составила для пентагонов 0.8381 ± 0.0020 . Это значение близко к величине, найденной по аналогичному алгоритму для упаковки жестких дисков (0.84–0.86). Корреляционные функции жестких дисков и пентагонов демонстрируют ряд общих закономерностей. В то же время «кристаллизация» ансамбля жестких дисков при относительно высоких плотностях, близких к максимально достигнутым, выражена более резко. При этом «пики» корреляционной функции для пентагонов (по сравнению с дисками) ожидали иметь меньшую высоту и большую ширину, более сложное строение. Ансамбли невыпуклых (non-convex) частиц с пентагональной симметрией (таких, как пятиконечные звезды) демонстрируют существенно меньшие плотности упаковки и не уплотняются до частичной «кристаллизации». Относительно простой алгоритм уплотнения «стартовых» случайных упаковок многоугольников, примененный в работе, позволяет «уплотнить» двухмерные ансамбли любых многоугольников (без самопересечений). Однако частичное упорядочение и достаточно высокие плотности (отвечающие началу «кристаллизации» ансамбля) достигаются при его использовании только для выпуклых (convex) полигональных частиц.

Ключевые слова: случайная упаковка, уплотнение, статистико-геометрические свойства, ансамбль пентагонов, жесткий диск, звездообразная частица, максимальная плотность, корреляционная функция

DOI: 10.31857/S0235010625010025

ВВЕДЕНИЕ

Случайные двухмерные и трехмерные упаковки одинаковых частиц представляют интерес как упрощенные модели дисперсных сред, коллоидов, жидких кристаллов, расплавов, металлических стекол, порошковых смесей и композитов [1–7]. Многие закономерности, характерные для трехмерных ансамблей, присутствуют и в двухмерных — сжатие последних используется как физико-химическая модель уплотнения и фазовых переходов в системах жидкость (расплав)-аморфная среда-кристаллическая фаза. Исследованию уплотнения и статистико-геометрических свойств ансамблей жестких дисков (hard disks, HD) посвящены многие работы [8–10]. Детально исследованы предельные плотности упаковки, корреляционные функции, координационные числа и их распределения [8], а также физико-химические свойства таких систем (при молекулярно-динамическом моделировании). Двухмерные ансамбли одинаковых частиц (фигур) несферической формы также были предметом многих исследований, начиная, видимо, с работы Онзагера [11]. В последние годы интерес к таким системам не уменьшается [12].

Свойства случайных ансамблей дисков и правильных многоугольников, полученных методом случайной последовательной адсорбции (RSA), были достаточно подробно изучены — например, в работах [13–20]. Алгоритм RSA включает размещение неперекрывающихся частиц со случайными координатами до «насыщения» поверхности. Этот алгоритм интуитивно понятен, хорошо запротоколирован и дает воспроизводимые результаты. Максимальные плотности упаковки для правильных пентагонов, полученные таким образом, составляют приблизительно 0.5413 [15] и практически не зависят от соотношения линейных размеров частиц и квадратного «бокса», в котором они размещаются, если это соотношение составляет менее 0.01 (что соответствует количеству частиц $> 10^4$).

Дальнейшее уплотнение «начальных» ансамблей частиц, полученных методом RSA, требует использования других алгоритмов. Наиболее распространенными являются модификации способа Любашевского—Стиллинджа [17], включающие пошаговое увеличение линейных размеров всех частиц упаковки с «релаксацией» на каждом шаге. Используется также моделирование «осаждения» частиц под действием направленной силы [18]. Вместе с тем до настоящего времени применяются и «натурные» эксперименты, при которых исследуются статистико-геометрические свойства случайных ансамблей реальных частиц, размещенных на плоском пластиковом столе и уплотняемых путем смещения границ упаковки [19, 20].

Автором [21–23] были определены предельные плотности случайных ансамблей жестких дисков и 3D-сфер, найдены координационные распределения для упаковок частиц произвольной формы (в частности, дисков) [24]. В работе [25] проведено сравнение функций радиального распределения и координационных чисел для всего ансамбля частиц и малой группы фиксированных (pinned) 2D- и 3D-сфер внутри него, найдены закономерности изменения среднего исключенного объема и уточнены предельные плотности случайных упаковок сфер.

Пентагон, возможно, является одним из наиболее интересных правильных многоугольников. Это связано с «золотым сечением» и другими его замечательными особенностями. Пентагональная симметрия в материалах, как правило, связана со структурой квазикристаллов [26] и металлических стекол [27, 28]. Частицы-кристаллы с пентагональной симметрией могут быть получены путем электрохимического осаждения ряда

металлов на плоской поверхности [29, 30]. В данной работе изучены статистико-геометрические свойства (предельные плотности, корреляционные функции) случайных ансамблей жестких правильных пентагонов при различных плотностях упаковки на плоскости. При этом начальные ансамбли получали методом RSA, а более плотные — с использованием модификации алгоритма Любашевского—Стиллинджера (LS). Свойства упаковок пентагонов сравнивались с таковыми для ансамблей жестких дисков, полученных аналогичным способом.

АЛГОРИТМЫ И КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Размещение частиц (с радиусом описанной окружности R , радиусом вписанной окружности r и площадью s) производили в квадратном боксе, при соотношении диаметра D и стороны бокса (L), равном 0.01 (общее число частиц N порядка 10^4). Статистико-геометрические свойства исследовали во «внутренней» области, достаточно удаленной от границ бокса, чтобы избежать «границных эффектов». Практически такая реализация отвечает периодическим граничным условиям для «внутреннего» бокса. При таком (или большем) общем количестве частиц N (вплоть до 10^5 – 10^6) статистико-геометрические свойства (в пределах статистического разброса) практически не изменяются для различных соотношений D/L . Так, предельные плотности упаковки $\eta = Ns/L^2$ для случайной последовательной адсорбции (осаждения) правильных пентагонов на плоскости составляют [15], соответственно, при $D/L = 0.01$; 0.003; 0.001 – 0.541319; 0.541241; 0.541344. Похожие закономерности были выявлены и в настоящей работе. Поэтому в данном исследовании использовали фиксированное соотношение D/L для частиц, равное 0.01.

Алгоритм RSA был реализован следующим образом. Частицы размещали последовательно, со случайными координатами, при этом количество «неудачных» попыток (итераций) для последней размещенной частицы было ограничено величиной K , которую изменяли в пределах $1 \cdot 10^2$ – $15 \cdot 10^7$. Зависимость достигнутого значения плотности упаковки от максимального числа итераций (на одну частицу) $\eta (K)$ (K) хорошо описывается степенным законом, аналогичным описанному в [14] для общего числа итераций (с несколько иными значениями параметров):

$$\eta (K) = A - B \cdot K^{(-1/C)}, \quad (1)$$

где величина A определяет максимально достижимую плотность упаковки при RSA, величины B и C – коэффициенты. Кривая зависимости (1) для ансамбля пентагонов показана на рис. 1. Она описывается уравнением (1) с высоким коэффициентом детерминации ($r^2 = 0.9989$). Величина наибольшей плотности для RSA, полученная нами, оказалась равной 0.54306 ± 0.00220 . Значения коэффициентов: $B = 0.64136 \pm 0.05760$; $C = 3.85916 \pm 0.21890$. Можно видеть, что данная плотность упаковки (в пределах статистического разброса) совпадает с литературным значением [15] – 0.541319.

«Стартовые» упаковки пентагональных частиц для дальнейшего уплотнения генерировали, не достигая предельных плотностей для алгоритма RSA. Как правило, ограничивались максимально заданным числом итераций (для последней размещенной частицы) от 1000 до 100000. При соотношении $D/L = 0.01$ это отве-

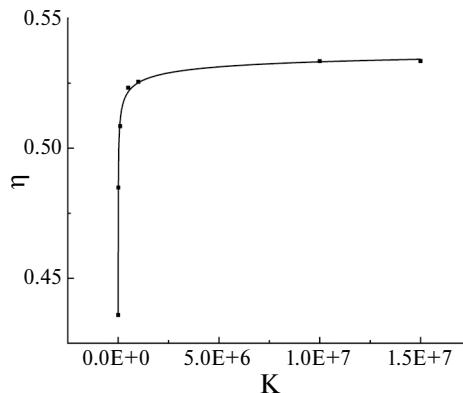


Рис. 1. Зависимость плотности упаковки η от максимального заданного числа итераций (K) на последнюю размещенную частицу.

чало количеству пентагонов приблизительно 7000–8000. Как отмечено выше, дальнейшее уменьшение D/L (и увеличение количества частиц до 10^5 и более) практически не сказывалось на результатах исследования статистико-геометрических свойств во «внутренней» области ансамбля. Последнюю выбирали обычно, отступая по 10% от длины L с каждой стороны бокса.

«Стартовую» упаковку со случайным расположением частиц уплотняли с помощью алгоритма, аналогичного способу LS [17]. Радиусы вписанной окружности r (и линейные размеры частиц) увеличивали пошагово, на каждом шаге умножая их на 1.001. После этого частицам задавали потенциальное перемещение в случайному направлении на малое случайное расстояние (с одновременным поворотом на малый случайный угол). Эти действия повторяли для всех частиц упаковки до достижения максимально заданного количества попыток M (обычно – не более 1000). Если при этом удавалось получить конфигурацию, при которой ни один из многоугольников не перекрывался с другим, а также не выходил за границу упаковки – эта новая конфигурация сохранялась в виде списка координат центров и ориентационных углов. После этого линейный размер частиц вновь увеличивался и все операции повторялись.

Подобный (в геометрическом отношении) способ уплотнения эффективен для случайных упаковок частиц различной формы в двухмерном и трехмерном пространстве (в частности, жестких дисков, жестких сфер, платоновых многогранников и др. [23, 25, 31, 32]). В случае правильных пентагонов такой алгоритм позволяет «уплотнить» исходный RSA-ансамбль от начальных плотностей упаковки $\eta \approx 0.45–0.50$ до конечных значений $\eta \approx 0.80–0.84$. В результате расчетов получали до нескольких сотен файлов-списков координат (для каждой промежуточной плотности упаковки), которые в дальнейшем использовали для визуализации, генерации кинематограмм уплотнения, исследования корреляционных функций и других свойств упаковок. На рис. 2 в качестве примера показана исходная (а) и конечная (б) упаковки пентагонов для относительно большого (в целях визуализации) размера частиц ($D/L = 0.1$). На рис. 3 дана зависимость величины количества попыток смещения M от достигнутой плотности упаковки.

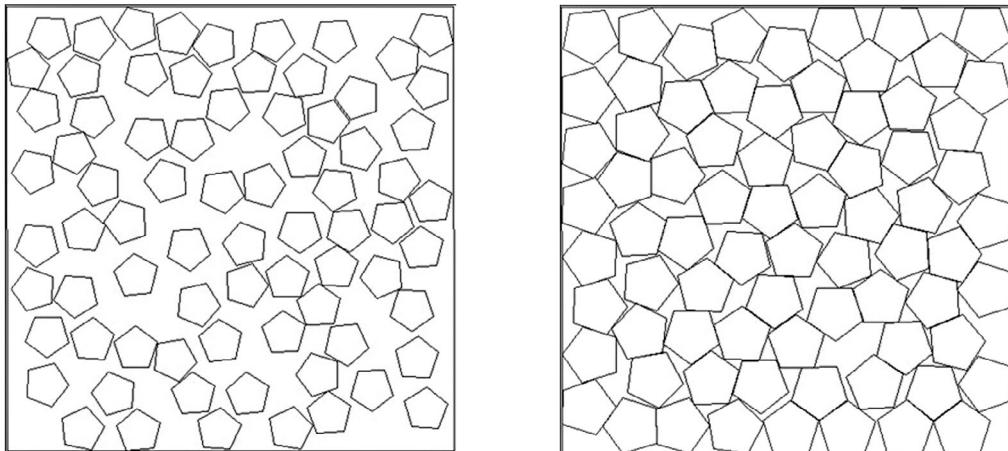


Рис. 2. Исходный (а) и финальный (б) ансамбли одинаковых правильных пентагонов в квадратном боксе при начальном соотношении $D/L \approx 0.1$

Это количество попыток практически не изменяется и составляет в среднем 2–5 на интервале плотностей от стартовой вплоть до ≈ 0.75 –0.77. После этого величина M резко возрастает и увеличивается асимптотически с приближением к максимальному достигнутой. Дальнейшее увеличение количества попыток практически не дает роста плотности упаковки. Иногда вблизи максимальной плотности встречаются локальные «выбросы» числа M с приближением к асимптоте (см. рис. 3).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Применение описанного выше алгоритма уплотнения позволяет получить случайные ансамбли жестких одинаковых пентагонов в квадратном боксе при плотности упаковки от стартовой (RSA) до максимально сжатой (близкой к так называемому

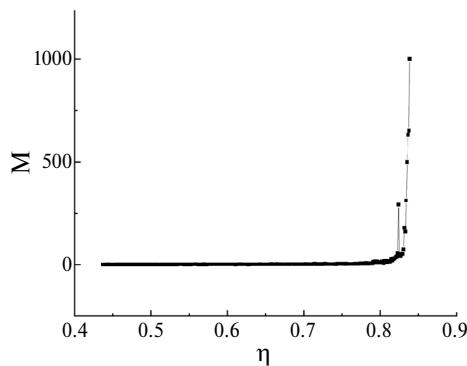


Рис. 3. Зависимость числа попыток смещения M от достигнутой плотности упаковки η .

maximally random jammed state, MRJ [2]). При заданном соотношении начального диаметра описанной вокруг частицы окружности и линейного размера ящика ($D/L = 0.01$) нами при каждом «запуске» программы были получены последовательности файлов-списков координат и углов ориентации частиц для различных плотностей упаковки с относительно малым «шагом».

На рис. 4 приведены результаты применения описанного выше алгоритма уплотнения при разных «стартовых» плотностях RSA-упаковки. Можно видеть, что при соотношении $D/L = 0.01$ финальная плотность (η_{\max}) практически не зависит от «стартовой». В линейной аппроксимации она составляет 0.8381 ± 0.0020 . Данное значение соответствует плотности упаковки для второго «фазового перехода» в системе жестких пентагонов, изученной методом Монте-Карло [33].

Для каждой из упаковок находили парную корреляционную функцию $G(x/d) = \rho/\rho_0$, где x – расстояние между центрами соседних частиц; $d = 2r$ – диаметр вписанной в пентагон окружности; ρ – числовая плотность, равная количеству центров соседних частиц на единицу площади в слое $[x; x+\Delta x]$ вокруг заданной частицы; ρ_0 – средняя числовая плотность (число частиц на единицу площади). Интервал Δx для расчетов выбирали равным $0.01d$. Статистико-геометрические свойства определяли методом Монте-Карло во «внутренней» области бокса со стороной ($L = 10D$) и центром, совпадающим с центром бокса. На рис. 5 показаны функции $G(x/d)$ для исходной, двух промежуточных и близкой к финальной плотностей упаковки.

На рис. 6 для сравнения представлены радиальные функции распределения для ансамбля жестких дисков с размерными характеристиками ($D/L = 0.002$, $N \sim 10^5$), полученными в настоящей работе по аналогичному алгоритму уплотнения. Отметим, что финальная плотность упаковки для ансамбля жестких частиц зависит от параметров алгоритма уплотнения. Так, для дисков достигнутая финальная плотность упаковки [34] варьировалась в пределах 0.852–0.895. При этом в ансамбле возрастает доля «кристаллической» фазы, что можно наблюдать как на его 2D-изображениях [34], так и по росту соответствующих пиков корреляционной функции.

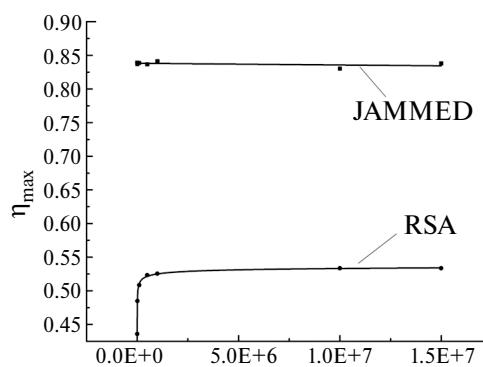


Рис. 4. Зависимость максимальной достигнутой плотности упаковки η_{\max} в стартовой и финальной (jammed) упаковке от заданного наибольшего числа итераций (K_{RSA}) на размещенную частицу в стартовом RSA-ансамбле.

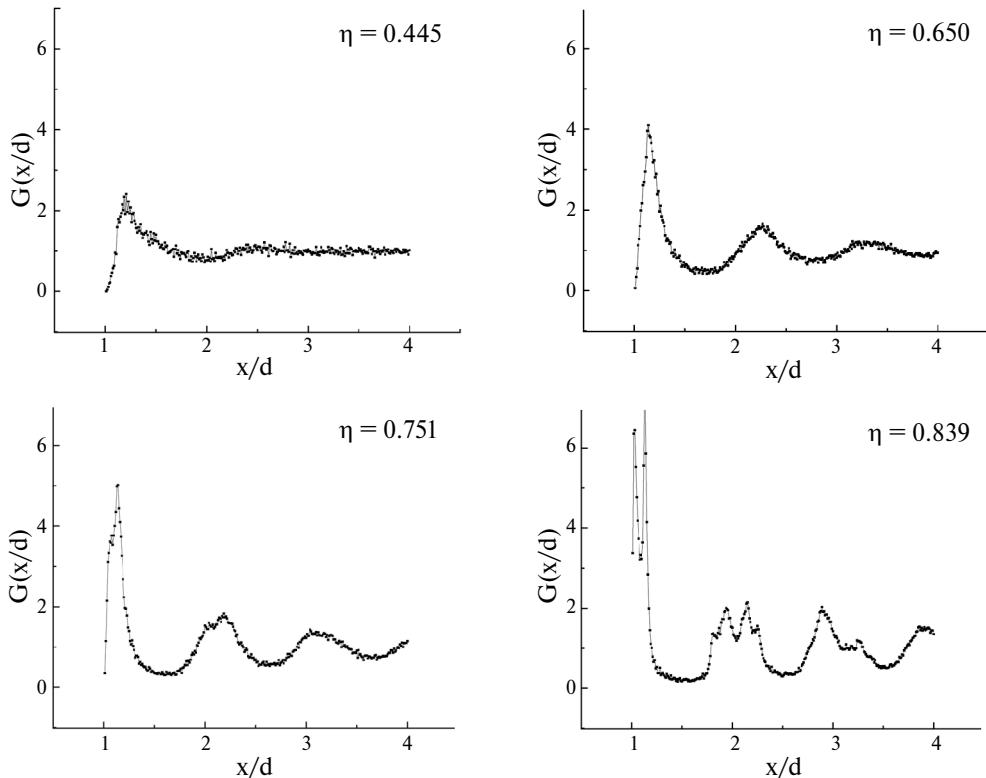


Рис. 5. Парные корреляционные функции ансамбля пентагонов для плотностей упаковки $\eta = 0.445$ (а), 0.650 (б), 0.751 (в) и 0.839 (г).

На рис. 7 приведены визуализированные массивы корреляционной функции $G(x/d)$ для уплотняемого ансамбля правильных пентагонов (в виде трехмерного графика для различных плотностей упаковки).

Для других частиц с пентагональной симметрией (пятиконечные звезды) нам не удалось с помощью описанного алгоритма получить финальные упаковки с плотностью η_{\max} , близкой к таковой для дисков и правильных пентагонов. В табл. 1 приведены максимальные плотности ансамблей пятиконечных звездообразных частиц, полученные в рамках описанного выше алгоритма уплотнения, в зависимости от радиуса вписанной окружности. При радиусе вписанной окружности $R=1$ и радиусе вписанной окружности $r \approx 0.809017$ звезда «вырождается» в правильный пятиугольник. При $R = r = 1$ многоугольник «вырождается» в диск.

Можно наблюдать, что использованный в работе алгоритм уплотнения «стартовой» RSA упаковки частиц позволяет получить достаточно высокие плотности для пентагонов. Звездообразные частицы с пентагональной симметрией (в зависимости от радиуса вписанной окружности) демонстрируют существенно меньшие плотности упаковки.

На графиках корреляционных функций (рис. 5, 6) можно видеть сравнительно близкое поведение ансамблей пентагонов и жестких дисков. В том и другом случае

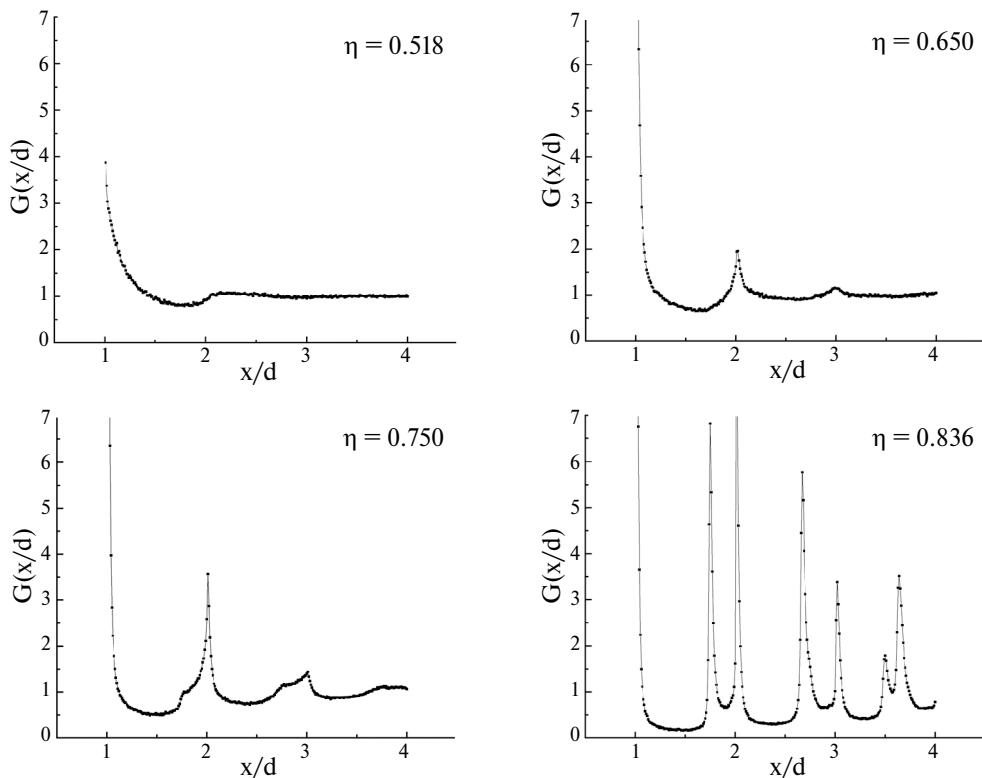


Рис. 6. Радиальные функции распределения для ансамбля жестких дисков при плотности упаковки $\eta = 0.518$ (а), 0.650 (б), 0.750 (в) и 0.836 (г).

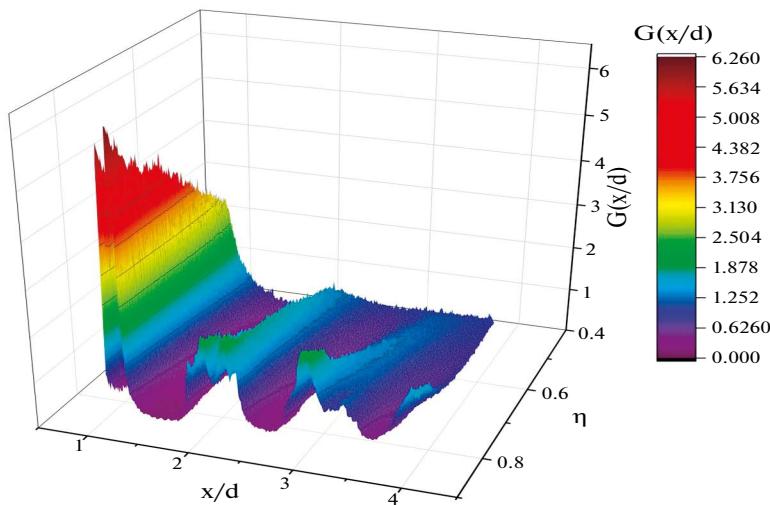


Рис. 7. Корреляционная функция $G(x/d)$ для случайного ансамбля правильных пентагонов при различных плотностях упаковки η .

Таблица 1. Максимальные плотности упаковки, достигнутые для ансамблей частиц с пентагональной симметрией

r/R	η_{\max}
0.161804	0.310
0.323608	0.480
0.381966 (пентаграмма)	0.544
0.485410	0.638
0.647214	0.736
0.809017 (пентагон)	0.838
1.0 (диск)	0.856

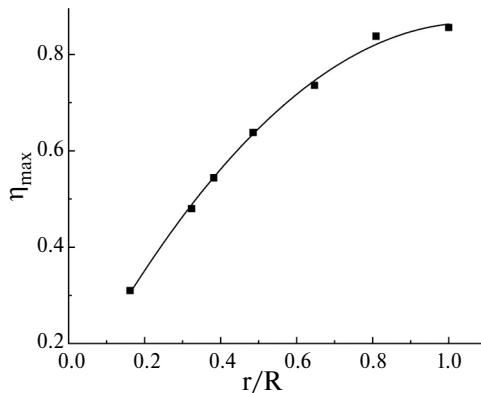


Рис. 8. Зависимость максимальной достигнутой плотности упаковки от соотношения радиусов вписанной и описанной окружности для звездообразных фигур с пентагональной симметрией.

наблюдается появление выраженных множественных пиков $G(x/d)$ уже после достижения плотности упаковки $\eta \approx 0.7$ и более. В то же время высота пиков в процессе частичной «кристаллизации» ансамбля существенно больше в случае жестких дисков. При этом первый пик $G(x/d)$ для пентагонов разделяется на два «подпика», а второй – на два «подпика», каждый из которых имеет боковое «плечо» (при достаточно высокой плотности упаковки). Для дисков пики, связанные с наличием «упорядоченной» фазы, выражены более четко.

В целом если рассматривать совокупность частиц с пентагональной симметрией, достаточно высоких плотностей удается достигнуть только для выпуклых частиц (правильных пятиугольников). Относительно простой механизм уплотнения, принятый в данной работе, для невыпуклых частиц (таких, как пентаграмма) работает менее эффективно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследованы плотности и статистико-геометрические характеристики случайных упаковок правильных пятиугольников на плоскости. Начальный ансамбль генерировали методом случайной последовательной адсорбции (RSA). Конечный ансамбль получали путем поэтапного увеличения линейных размеров двухмерных частиц при фиксированной плотности квадратного «бокса». Такой способ уплотнения упаковки является модификацией известного алгоритма Любашевского—Стиллинджа (Lubachevsky-Stillinger, LS). Показано, что плотность упаковки финального ансамбля для данного алгоритма практически не зависит от начальной плотности (при общем числе частиц порядка 10^4 и более). При этом плотности упаковки $\eta > 0.75$ —0.80, при которых наблюдается частичная «кристаллизация» ансамбля, достигаются только для выпуклых (convex) многоугольников. Случайные ансамбли других частиц с пентагональной симметрией (звезд) с различным соотношением радиусов вписанной и описанной окружностей не уплотняются до состояния, при котором могло бы начаться частичное упорядочение упаковки.

Максимальная плотность упаковки стартового ансамбля правильных пентагонов, полученная методом RSA, составила 0.54306 ± 0.00220 , что хорошо согласуется с литературным значением [15]. Наибольшая (финальная) плотность, достигнутая после уплотнения стартового ансамбля, составила для пентагонов 0.8381 ± 0.0020 . Это значение близко к величине, найденной по аналогичному алгоритму для упаковки жестких дисков (0.84—0.86).

Корреляционные функции жестких дисков и пентагонов демонстрируют ряд общих закономерностей. В то же время «кристаллизация» ансамбля жестких дисков при относительно высоких плотностях, близких к максимально достигнутым, выражена более резко. При этом «пики» $G(x/d)$ для пентагонов ожидаемо имеют меньшую высоту и большую ширину, более сложное строение, связанное с различием радиусов вписанной и описанной окружностей.

Отметим, что относительно несложный алгоритм уплотнения «стартовых» случайных упаковок многоугольников, примененный в работе, позволяет «уплотнить» двухмерные ансамбли любых выпуклых и невыпуклых многоугольников (без самопересечений). Однако частичное упорядочение и достаточно высокие плотности (отвечающие началу «кристаллизации» ансамбля) достигаются при его использовании только для выпуклых частиц.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Brouwers H.J.H. A geometric probabilistic approach to random packing of hard disks in a plane // Soft Matter. 2023. **19**. P. 8465–8471.
2. Atkinson S., Stillinger F.H., Torquato S. Existence of isostatic, maximally random jammed monodisperse hard-disk packings // PNAS. 2014. **111**. № 52. P. 18436–18441.
3. Tian J., Xu Y., Jiao Y., Torquato S. A Geometric-Structure Theory for Maximally Random Jammed Packings // Scientific Reports. 2015. **5**. P.16722 (1–9).
4. Jin Y., Makse H.A. A first-order phase transition defines the random close packing of hard spheres // Physica A. 2010. **389**. P. 5362–5379.

5. Bideau D., Gervois A., Oger L., Troadec J.P. Geometrical properties of disordered packings of hard disks // *J. Phys. France*. 1986. **47**. P.1697–1707.
6. Buryachenko V.A., Pagano N.J., Kim R.Y., Spowart J.E. Quantitative description and numerical simulation of random microstructures of composites and their effective elastic moduli // *International Journal of Solids and Structures*. 2003. **40**. № 1. P. 47–72.
7. Buryachenko V.A. *Micromechanics of Heterogeneous Materials*. Springer. 2007.
8. Iwata H., Homma T. Distribution of Coordination Numbers in Random Packing of Homogeneous Spheres // *Powder Technology*. 1974. **10**. № 1–2. P.79–83.
9. Speedy R.J. On the reproducibility of glasses // *J. Chem. Phys.* 1994. **100**. P. 6684–6691.
10. Donev A., Torquato S., Stillinger F.H., Connelly R. Jamming in hard sphere and disk packings // *J. of Applied Physics*. 2004. **95**. № 3. P. 989–999.
11. Onsager L. The Effects of Shape on the Interaction of Colloidal Particles // *Annals New-York Academy of Sciences*. 1949. **51**. P. 627–659.
12. Browers H.J.H. Random packing fraction of binary similar particles: Onsager's excluded volume model revisited // *Physics – Uspekhi*. 2024. **67**. № 5. P.510–529.
13. Ciesla M., Barbasz J. Random packing of regular polygons and star polygons on a flat two-dimensional surface//*Physical Review E*. 2014. **90**. P. 022402.
14. Ciesla M., Kubala P., Zhang G. Saturated random packing built of arbitrary polygons under random sequential adsorption protocol // *Physical Review E*. 2019. **100**. P. 062901-1-062901-7.
15. Zhang G. Precise algorithm to generate random sequential adsorption of hard polygons at saturation // *Physical Review E*. 2018. **97**. P. 043311(1–5).
16. Ciesla M., Kubala P., Moud A.A. Random sequential adsorption of aligned regular polygons and rounded squares: Transition in the kinetics of packing growth // *Physical Review E*. 2023. **107**. P. 054904(1–7).
17. Lubachevsky B.D., Stillinger F.H. Geometric properties of random disk packings// *Journal of Statistical Physics*. 1990. **60**. № 5/6. P.561–583.
18. Wang C., Dong K., Yu A. Structural characterization of the packings of granular regular polygons // *Physical Review E*. 2015. **92**. P. 062203(1–12).
19. Xu Y., Bares J., Zhao Y., Behringer R.P. Jamming Transition: Heptagons, Pentagons, and Discs // *EPJ Web of Conferences*. 2017. **140**. P. 06010(1–4).
20. Zhao Y., Bares J., Zheng H., Bester C.S., Xu Y., Socolar J.E.S. Behringer R.P. Jamming transition in non-spherical particle systems: pentagons versus disks // *Granular Matter*. 2019. **21**:90. P. 1–8.
21. Shubin A.B. Concerning the geometric limit of the density of a loose medium modeled by identical spherical particles // *J. of Engineering Physics and Thermophysics*. 1995. **68**. № 4. P. 460–463.
22. Shubin A.B. The geometric condition for density limits in idealized models of liquids // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 1996. **70**. № 4. P. 711–712.
23. Shubin A.B., Yatsenko S.P. Geometric constraints for the density limit in the two-dimensional model of liquid // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 1999. **73**. № 1. P. 140–141.
24. Шубин А.Б., Шуняев К.Ю. Случайный ансамбль жестких дисков – предельная плотность и статистико-геометрические свойства // *Расплавы*. 2006. № 5. С. 70–76.
25. Shubin A.B. Structural Characteristics of a Small Group of Fixed Particles and the Maximum Density of a Random Packing of Hard Spheres // *Russian Metallurgy (Metally)*. 2021. № 2. P. 181–186.
26. Steurer W. Twenty years of structure research on quasicrystals. Part I. Pentagonal, octagonal, decagonal and dodecagonal quasicrystals // *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*. 2004. **219**. P. 391–446.

27. Li M.Z. Correlation Between Local Atomic Symmetry and Mechanical Properties in Metallic Glasses // *Journal of Materials Science & Technology*. 2014. **30**. № 6. P. 551–559.
28. Fukunaga T., Itoh K., Otomo N., Mori K., Sugiyama M., Kato H., Hasegawa M., Hirata A., Hirotsu Y., Hannon A.C. Voronoi analysis of the structure of Cu–Zr and Ni–Zr metallic glasses // *Intermetallics*. 2006. **14**. P. 893–897.
29. Yasnitsk I.S., Vikarchuk A.A., Denisova D.A., Gryzunova N.N., Tsybuskina I.I. Electrodeposition of Nanostructure Objects with Pentagonal Symmetry // *Technical Physics*. 2007. **52**. № 10. P. 1328–1331.
30. Yasnitsk I.S. On the Problem of the Formation of an Open Sector instead of a Twin Boundary in Electrolytic Pentagonal Small Particles // *JETP Letters*. 2013. **97**. № 9. P. 513–516.
31. Jiao Y., Torquato S. Maximally random jammed packings of Platonic solids: Hyperuniform long-range correlations and isostaticity // *Physical Review E*. 2011. **84**. P. 041309 (1–7).
32. Baranau V., Tallarek U. Relaxation times, jamming densities, and ideal glass transition densities for hard spheres in a wide range of polydispersities // *AIP Advances*. 2020. **10**. P. 035212 (1–12).
33. Schilling T., Pronk S., Mulder B., Frenkel D. Monte Carlo study of hard pentagons // *Physical Review E*. 2005. **71**. P. 036138(1–6).
34. Lubachevsky B.D., Stillinger F.H., Pinson E.N. Disks vs. Spheres: Contrasting Properties of Random Packings // *Journal of Statistical Physics*. 1991. **64**, № 3/4.

RANDOM ENSEMBLES OF PARTICLES WITH PENTAGONAL SYMMETRY: DENSIFICATION AND PROPERTIES

A. B. Shubin*

*Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
101 Amundsen St., Ekaterinburg, 620016, Russian Federation*

**E-mail: fortran@list.ru*

The paper studies the densities and statistical-geometric characteristics of random packings of regular pentagons on a plane. The initial ensemble was generated by random sequential adsorption (RSA). A packing densification algorithm is proposed, which is a modification of the Lubachevsky-Stillinger (LS) method. The final ensemble was obtained by stepwise increasing the linear dimensions of 2-D particles at a fixed density of the square “box”. It is shown that the packing density of the final ensemble for this algorithm is practically independent of the density of the initial ensemble (with a total number of particles of about 10^4 or more). The maximum packing density of the starting ensemble of regular pentagons obtained by the RSA method was 0.54306 ± 0.00220 , which is in good agreement with the literature value of 0.54132. The highest (final) density achieved after compaction of the starting ensemble was 0.8381 ± 0.0020 for pentagons. This value is close to the value found by a similar algorithm for packing hard disks (0.84–0.86). The correlation functions of hard disks and pentagons demonstrate a number of common patterns. At the same time, the “crystallization” of the ensemble of hard disks at relatively high densities close to the maximum achieved is expressed more sharply. At the same time, the “peaks” of the correlation function for pentagons (compared to disks) are expected to have a smaller height and a larger width, a more complex structure. Ensembles of non-convex particles with pentagonal symmetry (such as five-pointed stars) demonstrate significantly lower packing densities and do not compact to partial “crystallization”. A relatively simple algorithm for compacting “starting” random packings of polygons, applied in the work, allows “compacting” two-dimen-

sional ensembles of any polygons (without self-intersections). However, partial ordering and sufficiently high densities (corresponding to the beginning of “crystallization” of the ensemble) are achieved when using it only for convex polygonal particles.

Keywords: random packing, densification, statistical-geometric properties, pentagon ensemble, hard disk, star-shaped particle, maximum density, correlation function

REFERENCES

1. Brouwers H.J.H. A geometric probabilistic approach to random packing of hard disks in a plane // *Soft Matter*. 2023. **19**. P. 8465–8471.
2. Atkinson S., Stillinger F.H., Torquato S. Existence of isostatic, maximally random jammed monodisperse hard-disk packings // *PNAS*. 2014. **111**. № 52. P. 18436–18441.
3. Tian J., Xu Y., Jiao Y., Torquato S. A Geometric-Structure Theory for Maximally Random Jammed Packings // *Scientific Reports*. 2015. **5**. P.16722 (1–9).
4. Jin Y., Makse H.A. A first-order phase transition defines the random close packing of hard spheres // *Physica A*. 2010. **389**. P. 5362–5379.
5. Bideau D., Gervois A., Oger L., Troadec J.P. Geometrical properties of disordered packings of hard disks // *J. Phys. France*. 1986. **47**. P. 1697–1707.
6. Buryachenko V.A., Pagano N.J., Kim R.Y., Spowart J.E. Quantitative description and numerical simulation of random microstructures of composites and their effective elastic moduli // *International Journal of Solids and Structures*. 2003. **40**. № 1. P. 47–72.
7. Buryachenko V.A. *Micromechanics of Heterogeneous Materials*. Springer. 2007.
8. Iwata H., Homma T. Distribution of Coordination Numbers in Random Packing of Homogeneous Spheres // *Powder Technology*. 1974. **10**. № 1–2. P.79–83.
9. Speedy R.J. On the reproducibility of glasses // *J. Chem. Phys.* 1994. **100**. P. 6684–6691.
10. Donev A., Torquato S., Stillinger F.H., Connelly R. Jamming in hard sphere and disk packings // *J. of Applied Physics*. 2004. **95**. № 3. P. 989–999.
11. Onsager L. The Effects of Shape on the Interaction of Colloidal Particles // *Annals New-York Academy of Sciences*. 1949. **51**. P. 627–659.
12. Browers H.J.H. Random packing fraction of binary similar particles: Onsager's excluded volume model revisited // *Physics – Uspekhi*. 2024. **67**. № 5. P.510–529.
13. Ciesla M., Barbasz J. Random packing of regular polygons and star polygons on a flat two-dimensional surface//*Physical Review E*. 2014. **90**. P. 022402.
14. Ciesla M., Kubala P., Zhang G. Saturated random packing built of arbitrary polygons under random sequential adsorption protocol // *Physical Review E*. 2019. **100**. P. 062901-1-062901-7.
15. Zhang G. Precise algorithm to generate random sequential adsorption of hard polygons at saturation // *Physical Review E*. 2018. **97**. P. 043311(1–5).
16. Ciesla M., Kubala P., Moud A.A. Random sequential adsorption of aligned regular polygons and rounded squares: Transition in the kinetics of packing growth // *Physical Review E*. 2023. **107**. P. 054904(1–7).
17. Lubachevsky B.D., Stillinger F.H. Geometric properties of random disk packings// *Journal of Statistical Physics*. 1990. **60**. № 5/6. P.561–583.
18. Wang C., Dong K., Yu A. Structural characterization of the packings of granular regular polygons // *Physical Review E*. 2015. **92**. P. 062203(1–12).
19. Xu Y., Bares J., Zhao Y., Behringer R.P. Jamming Transition: Heptagons, Pentagons, and Discs // *EPJ Web of Conferences*. 2017. **140**. P. 06010(1–4).

20. Zhao Y., Bares J., Zheng H., Bester C.S., Xu Y., Socolar J.E.S. Behringer R.P. Jamming transition in non-spherical particle systems: pentagons versus disks // *Granular Matter*. 2019. **21**:90. P. 1–8.
21. Shubin A.B. Concerning the geometric limit of the density of a loose medium modeled by identical spherical particles // *J. of Engineering Physics and Thermophysics*. 1995. **68**. № 4. P. 460–463.
22. Shubin A.B. The geometric condition for density limits in idealized models of liquids // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 1996. **70**. № 4. P. 711–712.
23. Shubin A.B., Yatsenko S.P. Geometric constraints for the density limit in the two-dimensional model of liquid // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 1999. **73**. № 1. P. 140–141.
24. Shubin A.B., Shunyaev K.Yu. Sluchaynyy ansambl' zhestkikh diskov – predel'naya plotnost' i statistiko-geometricheskiye svoystva (Random Ensemble of Hard Disks – Limit Density and Statistical-Geometric Properties) // *Rasplavy (Melts)*. 2006. № 5. P. 70–76.
25. Shubin A.B. Structural Characteristics of a Small Group of Fixed Particles and the Maximum Density of a Random Packing of Hard Spheres // *Russian Metallurgy (Metally)*. 2021. № 2. P. 181–186.
26. Steurer W. Twenty years of structure research on quasicrystals. Part I. Pentagonal, octagonal, decagonal and dodecagonal quasicrystals // *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*. 2004. **219**. P. 391–446.
27. Li M.Z. Correlation Between Local Atomic Symmetry and Mechanical Properties in Metallic Glasses // *Journal of Materials Science & Technology*. 2014. **30**. № 6. P. 551–559.
28. Fukunaga T., Itoh K., Otomo N., Mori K., Sugiyama M., Kato H., Hasegawa M., Hirata A., Hirotsu Y., Hannon A.C. Voronoi analysis of the structure of Cu–Zr and Ni–Zr metallic glasses // *Intermetallics*. 2006. **14**. P. 893–897.
29. Yasnikov I.S., Vikarchuk A.A., Denisova D.A., Gryzunova N.N., Tsybuskina I.I. Electrodeposition of Nanostructure Objects with Pentagonal Symmetry // *Technical Physics*. 2007. **52**. № 10. P. 1328–1331.
30. Yasnikov I.S. On the Problem of the Formation of an Open Sector instead of a Twin Boundary in Electrolytic Pentagonal Small Particles // *JETP Letters*. 2013. **97**. № 9. P. 513–516.
31. Jiao Y., Torquato S. Maximally random jammed packings of Platonic solids: Hyperuniform long-range correlations and isostaticity // *Physical Review E*. 2011. **84**. P. 041309 (1–7).
32. Baranau V., Tallarek U. Relaxation times, jamming densities, and ideal glass transition densities for hard spheres in a wide range of polydispersities // *AIP Advances*. 2020. **10**. P. 035212 (1–12).
33. Schilling T., Pronk S., Mulder B., Frenkel D. Monte Carlo study of hard pentagons // *Physical Review E*. 2005. **71**. P. 036138(1–6).
34. Lubachevsky B.D., Stillinger F.H., Pinson E.N. Disks vs. Spheres: Contrasting Properties of Random Packings // *Journal of Statistical Physics*. 1991. **64**, № 3/4.