

压缩过程中允许临时重叠对硬质颗粒体系 密排密度及构型的影响*

张书琛 万端端†

(武汉大学物理科学与技术学院, 武汉 430072)

(2025 年 4 月 25 日收到; 2025 年 5 月 29 日收到修改稿)

硬质颗粒在受限空间中的致密排列具有重要的物理意义, 并为许多其他物理系统提供了启发. 如何实现硬质颗粒在受限空间中的高密度排列, 是一个具有挑战性的问题. 本文运用蒙特卡罗方法, 结合边界压缩机制, 研究了二维圆形、正方形和长宽比为 5:1 的矩形颗粒在圆形受限空间中的致密排列. 具体而言, 探讨了在压缩过程中不允许颗粒重叠以及允许少数颗粒重叠、后移除重叠 (允许临时重叠) 两种方法下所能获得的最高密度. 研究发现, 允许临时重叠的方法能够实现更高的密排构型. 本文进一步比较了两种压缩方式下获得的构型的径向分布函数和取向序参量, 发现两者具有相似的特征, 但允许临时重叠的方式在更大区域内显示出有序性. 研究表明, 允许颗粒临时重叠可能是提高受限空间中排列密度的有效途径.

关键词: 硬质颗粒, 重叠, 排列密度, 构型

PACS: 64.75.Yz, 47.57.J-, 05.40.Jc, 61.46.Hk

DOI: 10.7498/aps.74.20250552

CSTR: 32037.14.aps.74.20250552

1 引言

颗粒在受限空间中的致密排列既是一个数学问题, 也是一个统计物理问题. 从数学角度来看, 它属于最密堆积问题 (packing problem)^[1], 即在特定受限条件下如何最大化颗粒的填充密度. 从统计物理的角度, 它涉及的一个典型物理体系是受限空间中的颗粒自组装^[2-8]. 近期 Marino 等^[9] 总结并展望了微观颗粒在受限空间中的自组装研究. 当微观颗粒 (如纳米颗粒或胶体颗粒) 的形状主导其自组装结构, 且其他相互作用可忽略时, 这些颗粒可近似视为硬质颗粒. 硬颗粒模型在颗粒自组装研究领域被广泛应用^[10,11].

研究硬质颗粒在受限空间中的致密排列不仅有助于理解微观颗粒在有限空间内自发组装形成

的密排结构, 也为其他受限体系中的致密排列问题提供重要参考. 例如, DNA 在病毒衣壳中的紧密排列^[12]、大分子在细胞中的拥挤排布^[13]、血液凝结^[14]以及生物结构中的图案形成^[15]等现象均涉及受限空间中的高密度堆积. 此外, 该研究还与液晶在受限条件下的生长^[16-19]、熵垒条件下的粒子输运^[20,21]以及胶体排空系统的性质^[22-27]密切相关. 尽管硬质颗粒在受限空间中的致密排列具有重要的物理意义, 但实现高密度排列仍面临挑战. 已有研究尝试了多种方法来探索受限空间中硬颗粒的致密排列, 例如模拟退火方法^[28]、能量最小化方法^[29,30]、逐步压缩方法^[31]和随机生成粒子^[32]等方法. Haji-Akbari 等^[33] 研究了正四面体在周期性边界条件下的排列, 并指出允许少量颗粒临时重叠、后移除重叠 (以下简称允许临时重叠) 有助于实现更高密度的压缩.

* 国家自然科学基金 (批准号: 12274330) 和武汉市知识创新专项曙光计划 (批准号: 2022010801020125) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ddwan@whu.edu.cn

本文旨在探讨允许颗粒临时重叠是否有助于受限空间中的致密排列. 为简化问题, 从二维体系入手, 研究了在压缩过程中允许临时重叠对二维圆形颗粒、正方形颗粒及长宽比为 5 的矩形颗粒在圆形受限边界条件下的密排密度的影响. 研究结果表明, 允许临时重叠可实现更高密度的排列. 此外, 对比分析了允许与不允许临时重叠条件下的构型, 发现两者在排列特征上具有一定相似性. 结果表明, 允许颗粒临时重叠可能是提高受限空间致密堆积密度的有效方法.

2 压缩方法

硬质颗粒系统的蒙特卡罗方法是一种基于统计物理的随机模拟技术, 广泛应用于研究硬质颗粒的排列、相行为、热力学性质以及相互作用等问题^[33-41]. 由于硬质颗粒系统中颗粒间仅存在排斥作用, 其势能呈现非连续性 (要么为零, 要么为无穷), 且依赖于颗粒的几何形状 (可能具有各向异性), 这使得传统的解析方法难以处理. 此外, 分子动力学方法通常依赖于势能的平滑变化来计算力, 从而推动粒子演化, 而在硬质颗粒系统中, 排斥作用不产生可微分的力, 这使得分子动力学模拟面临挑战. 相比之下, 蒙特卡罗方法通过随机抽样探索系统的构型空间, 并利用 Metropolis 准则接受或拒绝新构型, 从而有效逼近平衡态, 因此成为研究此类系统的有力工具.

本文使用 Hoomd-Blue 软件^[42] 中的硬质颗粒蒙特卡罗模块 (hard particle Monte Carlo, HPMC) 将颗粒从低密度压缩至高密度, 并研究允许临时重叠带来的影响. 硬质颗粒蒙特卡罗方法的基本步骤如下.

1) 初始化构型: 随机生成初始的颗粒构型. 对于每个颗粒, 给定它们的位置和可能朝向.

2) 随机移动: 在每个蒙特卡罗尝试中, 随机选择一个颗粒, 并对其位置或方向进行微小的变动. 变动包括随机平移或旋转.

3) 检查颗粒是否重叠: 对于圆形颗粒, 如果两个颗粒之间的距离小于它们的半径和之和, 则认为颗粒重叠. 对于凸多边形, Hoomd 中的 HPMC 模块采用分离轴定理判断颗粒是否重叠^[42].

4) 接受准则: 使用 Metropolis 接受准则来决定是否接受新的构型, 即接受新构型的概率为 $P_{\text{accept}} =$

$\min(1, e^{-\Delta E/k_B T})$. 其中 k_B 表示玻尔兹曼常数, T 为体系温度, ΔE 表示体系能量的变化. 在硬质颗粒模型中, 若颗粒在移动后无重叠, 则体系能量变化 $\Delta E = 0$; 若产生重叠, 则 $\Delta E = \infty$. 因此, 若移动后无重叠, 则接受该移动; 若移动导致颗粒重叠, 则拒绝此次尝试, 体系状态保持不变.

5) 重复步骤 2)–4): 不断重复随机移动、检查约束和应用接受准则, 直到达到所需的蒙卡步数.

在压缩过程中, 我们设置了不允许重叠和允许临时重叠两种方式, 其中允许临时重叠的方法基于 Haji-Akbari 等^[33] 的思路. 对于圆形颗粒, 体系的单位长度选择为粒子半径; 对于正方形和长宽比为 5 的矩形颗粒, 单位长度取为粒子外接圆半径. 对于每种粒子形状的研究, 均在圆形腔中放置 200 个粒子. 在密度约为 0.1 的条件下, 通过随机生成粒子的位置和朝向, 初始化了 10 组样本. 由于系统为硬颗粒模型, 粒子之间不存在相互作用 (仅需避免重叠), 我们为每组样本设置了不同的随机数种子, 从而确保这些初始构型在统计上彼此独立. 粒子的蒙特卡罗移动包括平动和旋转, 平动的最大步长设为 D , 旋转的最大角度设为 0.3 rad. 初始步长 D 取值为 0.5.

压缩过程根据接受率来调整步长 D , 以不允许重叠的方式为例, 具体实现步骤如下: 针对当前密度, 先进行 100 步蒙特卡罗模拟, 并计算系统的接受率 f (即接受粒子平动与总尝试次数的比值). 初始密度和步长的设定会使 f 接近 1. 压缩循环如下: 若 $f > 0.3$, 从 $1 - D - 1$ 间随机选择一个压缩系数, 将圆形边界半径和粒子坐标分别乘以该系数 (保持粒子朝向不变). 若尝试压缩导致边界与粒子或粒子之间的重叠, 则拒绝此次尝试, 恢复原位置; 若未引起任何重叠, 则接受新位置. 无论压缩是否成功, 均执行 10 步蒙特卡罗并重新计算 f . 当 f 降至 0.3 以下时, 退出压缩循环. 此时更新步长 D 为 $0.98 \cdot D$, 再执行 100 步蒙特卡罗模拟, 重新计算接受率. 若 $f < 0.3$, 继续更新步长, 直至 $f > 0.3$ 后进入压缩循环. 此方法有助于选择合适步长, 使接受率保持在 0.3 附近. 当 D 小于给定阈值 10^{-5} 时, 停止模拟并导出当前构型.

对于允许临时重叠的压缩方式, 压缩循环中若尝试压缩引起的总重叠数 (包括粒子与边界重叠数及粒子间重叠数) 超过粒子总数的 2%, 则拒绝该次尝试并恢复原位置; 若重叠数不超过总粒子的

2%, 则接受此次压缩, 并每 20 步统计一次重叠数, 直至所有重叠被消除. 其他流程与不允许重叠的压缩方式相同.

3 结果与讨论

图 1 展示了采用不允许重叠和允许临时重叠两种压缩方法所获得的体系最终密度 Φ . 对于每种颗粒形状, 柱状图显示了 10 个独立样本的平均密

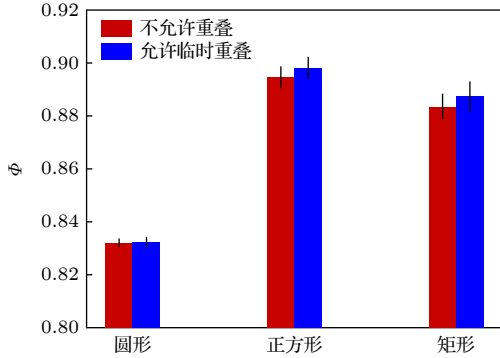


图 1 不允许重叠和允许临时重叠两种压缩方式得到的密度 Φ . 每个形状取了 10 个独立样本做平均, 误差线为标准差
Fig. 1. Average maximum packing densities Φ achieved using two methods: one disallowing overlaps and the other allowing a few temporary overlaps. Results are averaged over 10 independent samples, with error bars indicating the standard error.

度值, 误差棒表示标准差. 由图 1 中可见, 对于圆形颗粒, 两种压缩方法所得结果差异不大; 但对于正方形和长方形颗粒, 允许临时重叠显著提高了最终密度. 表 1 列出了 10 次统计中的最高密度值. 对于圆形颗粒, 允许临时重叠和不允许重叠的最高密度非常接近, 且仅略低于 $N = 200$ 个颗粒在圆形腔体中的最高密度 0.8364^[43]. 这验证了本文所设计压缩方法在获取高密度构型方面的有效性. 对于正方形和矩形颗粒, 未找到可供直接对比的最高密度的文献数据; 在本研究中, 允许临时重叠的方式得到了更高的最高密度.

表 1 10 个样品中粒子的最大密排密度

Table 1. Maximum packing density of particles across 10 independent samples.

粒子形状	不允许重叠	允许临时重叠
圆形	0.8344	0.8346
正方形	0.8997	0.9025
矩形	0.8942	0.8951

为进一步比较两种压缩方式所得构型的差异, 图 2 展示了两种压缩方式下获得的最高密度构型中颗粒的径向分布统计. $g(r)$ 是径向分布函数, 其计算方法如下: 取宽度为 2 的圆环 (对应柱状图中柱子的宽度), 统计质心位置落于该圆环内的粒子

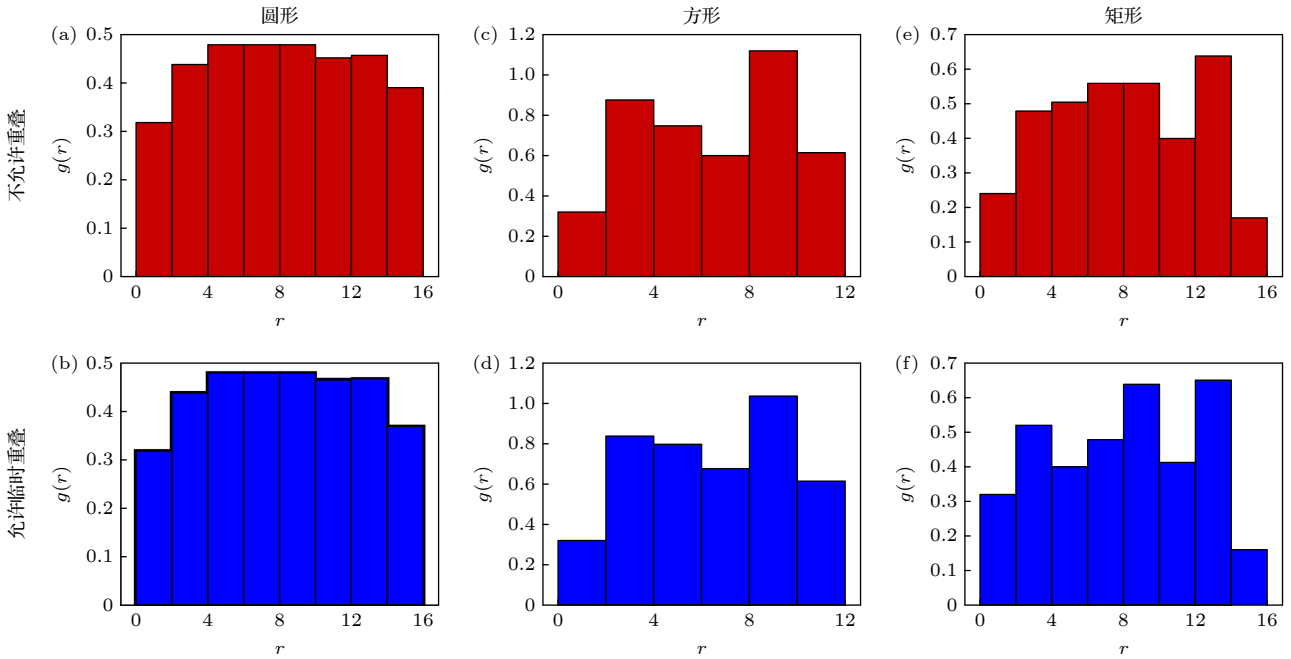


图 2 最高密度构型中, 颗粒质心的径向分布函数 $g(r)$ 之于颗粒到圆心距离 r

Fig. 2. Radial distribution function $g(r)$ of particle centers as a function of the distance r from the center in the highest-density configuration.

数 n , 然后除以圆环的面积以归一化. 由图 2 可见, 两种压缩方式的径向分布函数对于圆形、正方形和长宽比为 5 的长方形, 均无显著差异.

为了进一步比较两种压缩方式对颗粒局域分布的影响, 本文采用局部取向序参数 φ_{nj} [44-46], n 为对称性重数, j 为粒子标号:

$$\varphi_{nj} = \left| \sum_{k=1}^{n_j} \frac{1}{n_j} e^{in\theta_{jk}} \right|. \quad (1)$$

此处 n_j 为粒子 j 的最近邻粒子数, θ_{jk} 表示粒子 j 与相邻的第 k 个粒子的连线与某一固定方向 (如 x 轴正方向) 之间的夹角. $\varphi_{nj} \leq 1$, 用于表征周围粒子的对称性. $\varphi_{nj} = 1$ 时, 表示最近邻粒子具有完美的 n 重对称性. 对于全局序参量, 则考虑所有颗粒最近邻成键与固定方向之间的夹角, 即

$$\varphi_n = \left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{n_j} \frac{1}{n_j} e^{in\theta_{jk}} \right|. \quad (2)$$

对于圆形, 其最密排结构为三角晶格, 故选择 φ_6 为序参量. 对正方形, 其最密排结构为正方晶格, 故选择 φ_4 为序参量. 对于矩形, 其最密排时粒子左右两边分别有矩形紧密贴合, 故考虑用 φ_2 为序参量. 表 2 给出了对最密排构型, 各个形状的粒子的全局序参量值.

表 2 最密堆积构型中粒子的全局序参数
Table 2. Value of order parameter φ_n in the densest packing configuration.

粒子序参量	不允许重叠	允许临时重叠
圆形 (φ_6)	0.6329	0.7250
正方形 (φ_4)	0.3298	0.4644
矩形 (φ_2)	0.1255	0.05013

图 3 给出了两种方式所得到的最密排堆积结构, 其中颜色表示局域序参量 φ_{nj} 的数值. 对于圆形颗粒, 从图 3(a) 和图 3(b) 可以看出, 两种压缩方式均在体系中心区域形成了较好的密排 (φ_{6j} 值接近于 1). 但随着距离边界的接近, 颗粒的排列不再紧密, 产生了一些空隙, φ_{6j} 的值逐渐减小. 该规律在两种压缩方法的构型中均有体现. 对于允许临时重叠的方式, 中间密排区域更大, 全局序参量 φ_6 值也更大 (见表 2).

对于正方形颗粒, 从图 3(c) 和图 3(d) 可以看出, 两种压缩方式均使颗粒在中心区域呈正方晶格排列, 这些地方具有较高的 φ_{4j} 值. 在不允许重叠的压缩方式下 (图 3(c)), 边缘处形成了两圈 (部分地方三圈) 圆形排列, 与圆形边界契合且与中心区域正方晶格间存在空隙, 导致较低的 φ_{4j} 值. 允许临时重叠的压缩方式 (图 3(d)) 在边缘的总体排列

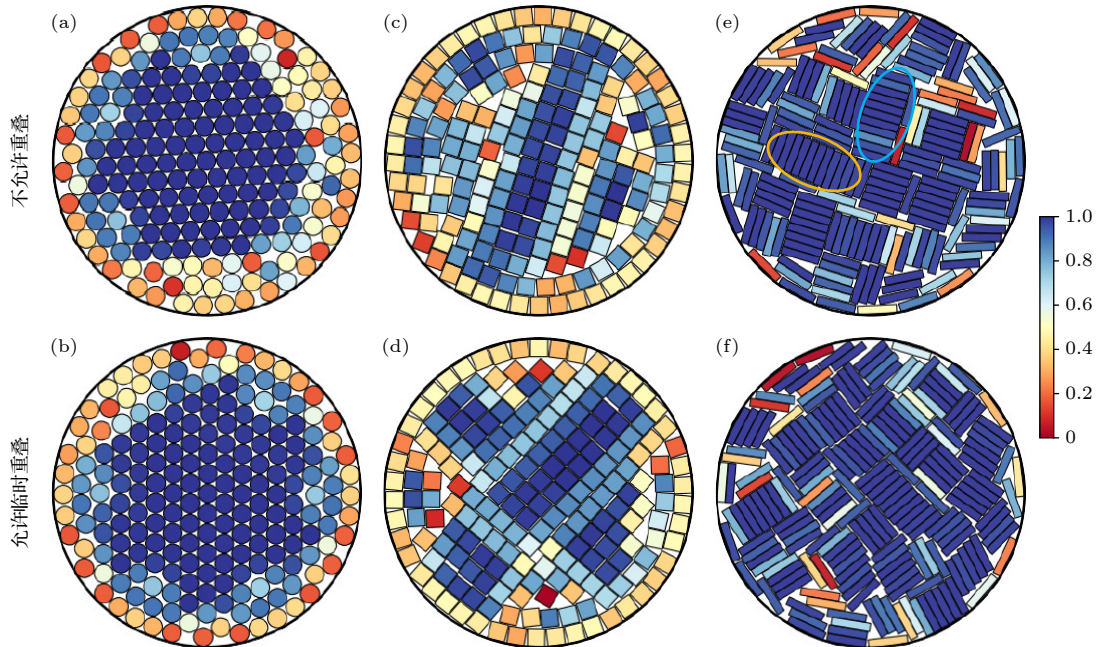


图 3 硬盘、正方形和矩形颗粒最密排列结构. 粒子颜色分别对应了序参量 φ_{6j} , φ_{4j} 和 φ_{2j} 的大小. 图 (e) 中标出了矩形颗粒形成的局部簇 (黄色和蓝色圆圈)

Fig. 3. Densest configurations from the two methods. The color bar of disks, squares and rectangles correspond to the magnitude of the order parameters φ_{6j} , φ_{4j} and φ_{2j} , respectively. In panel (e), local clusters of rectangular particles are marked with yellow and blue circles.

特征与不允许重叠的构型相似, 边缘部分形成了一到两圈圆形排列, 少数区域达到三圈圆形排列. 类似圆形颗粒, 由于允许临时重叠的方式获得构型中, 中间密排区域更大, 全局序参量 φ_4 值也更大 (见表 2).

对于长宽比为 5 的矩形颗粒, 从图 3(e) 和图 3(f) 可以看出, 两种压缩方式均在体系中形成了类似液晶层状相的块状区域. 在不允许重叠的压缩方式下 (图 3(e)), 这些区域中的颗粒长边对长边排列, 头尾几乎对齐, 呈紧密排列状态, 局域序参量 φ_{2j} 较高; 边缘少量颗粒沿着圆形边界排列, 序参量 φ_{2j} 相对较低. 由于体系中存在多个近似相互垂直排列的局部簇 (例如图 3(e) 中黄色与蓝色圆圈所示), 这些簇内粒子在计算 θ_{jk} 时的角度相差约为 $\pi/2$, 导致其在计算全局序参量时的贡献趋于相互抵消, 从而 φ_2 值较小. 在允许临时重叠的压缩方式下 (图 3(f)), 整体特征与图 3(e) 相同, 但序参量较高的块状区域比例更大.

允许颗粒临时重叠主要通过克服局部势垒和优化颗粒排列来提高密度. 对于克服局部势垒, 这一机制类似于在连续势能体系中, 通过升高温度使系统越过局部势垒, 随后缓慢降温以寻找更优的低能态. 对于优化颗粒排列, 在我们的模拟中, 步长是依据接受率动态调整的, 这意味着当两个颗粒移除重叠时, 它们往往会处于紧邻状态, 从而减少额外空隙, 有助于提高最终的堆积密度.

我们的研究显示, 允许临时重叠对圆形颗粒的密度提升较小, 而对正方形和矩形颗粒的提升较大, 原因可能如下.

1) 圆形颗粒的密度提升较小

(a) 旋转对称性: 圆形颗粒无需调整取向即可实现紧密堆积, 在逐步压缩过程中, 本身已能较好地填充空间. 这一点也可以从逐步压缩方法在不允许临时重叠的情况下, 仍能使体系接近已知的最密排密度看出.

(b) 有限的优化自由度: 圆形颗粒的移动自由度仅限于平移, 缺乏旋转优化的可行性. 因此, 即使允许短暂重叠, 最终形成的结构仍接近最优密排, 导致密度提升有限.

2) 正方形和矩形颗粒的密度提升较大

(a) 取向优化作用: 正方形和矩形颗粒具有额外的旋转自由度. 在允许临时重叠的情况下, 颗粒可以调整取向, 从而更容易找到高密度的构型, 提

高填充率.

(b) 局部空隙调整: 非圆形颗粒在堆积过程中容易形成较大的局部空隙 (例如, 正方形颗粒在无序排列时可能留下三角形或其他不规则空隙). 临时重叠可能使颗粒穿过不利的局部构型, 重新排列得更紧密, 从而提升整体密度.

(c) 受限边界适应性: 在有限空间中, 非圆形颗粒需要调整取向以适应边界形状. 临时重叠提供了更大的调整空间, 使颗粒更容易找到更致密的排列方式.

4 总 结

本文采用蒙特卡罗方法, 结合边界压缩机制, 研究了硬质颗粒压缩过程中可实现的最密排列构型. 具体而言, 使用在压缩过程中不允许重叠和允许临时重叠两种方式, 研究了二维圆形、正方形和长宽比为 5:1 的矩形颗粒在圆形受限空间中的最密排列构型. 研究结果显示, 对于圆形颗粒, 两种方式的最高密度接近, 且均略低于已知的圆形颗粒在圆形边界中的最高密度值. 对于正方形和矩形颗粒, 研究发现, 允许临时重叠的方式能够实现比不允许重叠更高的排列密度. 通过比较两种方式下获得构型的径向分布函数和取向序参量, 发现两者构型特征基本相同, 但允许临时重叠所得构型在更大区域内表现出更高的有序性. 本文研究结果表明, 允许颗粒临时重叠可能是提高受限空间堆积密度的有效方法. 本工作聚焦于三种简单的二维凸形粒子. 未来, 我们计划进一步评估允许临时重叠的方法在三维受限空间中多面体粒子体系中的适用性, 并拓展至凹形粒子体系以及多组分混合粒子体系中的应用.

感谢武汉大学物理科学与技术学院李鑫的讨论.

参考文献

- [1] Conway J H, Sloane N J A 2013 *Sphere Packings, Lattices and Groups* (Vol. 290) (New York: Springer Science & Business Media)
- [2] Velev O D, Lenhoff A M, Kaler E W 2000 *Science* **287** 2240
- [3] De Nijs B, Dussi S, Smalenburg F, Meeldijk J D, Groenendijk D J, Filion L, Imhof A, Van Blaaderen A, Dijkstra M 2015 *Nat. Mater.* **14** 56
- [4] Chen Y, Yao Z, Tang S, Tong H, Yanagishima T, Tanaka H, Tan P 2021 *Nat. Phys.* **17** 121

- [5] Wang D, Dasgupta T, van der Wee E B, Zanaga D, Altantzis T, Wu Y, Coli G M, Murray C B, Bals S, Dijkstra M 2021 *Nat. Phys.* **17** 128
- [6] Wang D, Hermes M, Kotni R, Wu Y, Tasios N, Liu Y, De Nijs B, Van Der Wee E B, Murray C B, Dijkstra M 2018 *Nat. Commun.* **9** 2228
- [7] Wu S, Li W B, Shi F, Jiang S C, Lan D, Wang Y R 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 096101 (in Chinese) [吴赛, 李伟斌, 石峰, 蒋世春, 蓝鼎, 王育人 2015 物理学报 **64** 096101]
- [8] Liu X Z, Wang H G 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 238201 (in Chinese) [刘心卓, 王华光 2020 物理学报 **69** 238201]
- [9] Marino E, LaCour R A, Kodger T E 2024 *Cryst. Growth Des.* **24** 6060
- [10] Boles M A, Engel M, Talapin D V 2016 *Chem. Rev.* **116** 11220
- [11] Glotzer S C, Solomon M J 2007 *Nat. Mater.* **6** 557
- [12] Marenduzzo D, Micheletti C, Orlandini E 2010 *J. Phys. Condens. Matter* **22** 283102
- [13] Ellis R J 2001 *Trends Biochem. Sci.* **26** 597
- [14] Cines D B, Lebedeva T, Nagaswami C, Hayes V, Masefski W, Litvinov R I, Rauova L, Lowery T J, Weisel J W 2014 *Blood* **123** 1596
- [15] Hayashi T, Carthew R W 2004 *Nature* **431** 647
- [16] van Roij R, Dijkstra M, Evans R 2000 *Europhys. Lett.* **49** 350
- [17] de las Heras D, Velasco E, Mederos L 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 017801
- [18] Galanis J, Nossal R, Losert W, Harries D 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 168001
- [19] Chen J Z 2013 *Soft Matter* **9** 10921
- [20] Burada P S, Schmid G, Reguera D, Vainstein M H, Rubi J, Hänggi P 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 130602
- [21] Reguera D, Luque A, Burada P S, Schmid G, Rubi J, Hänggi P 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 020604
- [22] Oosawa F, Asakura S 1954 *J. Chem. Phys.* **22** 1255
- [23] Asakura S, Oosawa F 1958 *J. Polym. Sci.* **33** 183
- [24] Crocker J C, Matteo J A, Dinsmore A D, Yodh A G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 4352
- [25] Zhao K, Mason T G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 268301
- [26] Zhao K, Mason T G 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 148301
- [27] Ma H R 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 184701 (in Chinese) [马红磊 2016 物理学报 **65** 184701]
- [28] Mughal A, Chan H, Weaire D, Hutzler S 2012 *Phys. Rev. E* **85** 051305
- [29] Chen D, Torquato S 2015 *Phys. Rev. E* **92** 062207
- [30] Oğuz E C, Marechal M, Ramiro-Manzano F, Rodriguez I, Messina R, Meseguer F J, Löwen H 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 218301
- [31] Teich E G, Van Anders G, Klotsa D, Dshemuchadse J, Glotzer S C 2016 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **113** E669
- [32] Wan D, Glotzer S C 2018 *Soft Matter* **14** 3012
- [33] Haji-Akbari A, Engel M, Keys A S, Zheng X, Petschek R G, Palffy-Muhoray P, Glotzer S C 2009 *Nature* **462** 773
- [34] Gang O, Zhang Y 2011 *ACS Nano* **5** 8459
- [35] Kraft D J, Ni R, Smalenburg F, Hermes M, Yoon K, Weitz D A, van Blaaderen A, Groenewold J, Dijkstra M, Kegel W K 2012 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **109** 10787
- [36] Agarwal U, Escobedo F A 2011 *Nat. Mater.* **10** 230
- [37] Damasceno P F, Engel M, Glotzer S C 2012 *Science* **337** 453
- [38] Ni R, Gantapara A P, De Graaf J, Van Roij R, Dijkstra M 2012 *Soft Matter* **8** 8826
- [39] Marechal M, Kortschot R J, Demirörs A F, Imhof A, Dijkstra M 2010 *Nano Lett.* **10** 1907
- [40] Chen D, Jiao Y, Torquato S 2014 *J. Phys. Chem. B* **118** 7981
- [41] Wan D, Du C X, van Anders G and Glotzer S C 2019 *J. Phys. Chem. B* **123** 9038
- [42] Anderson J A, Glaser J, Glotzer S C 2020 *Comput. Mater. Sci.* **173** 109363
- [43] Specht E <http://hydra.nat.uni-magdeburg.de/packing/>
- [44] Steinhardt P J, Nelson D R, Ronchetti M 1983 *Phys. Rev. B* **28** 784
- [45] Walsh L, Menon N 2016 *J. Stat. Mech: Theory Exp.* **2016** 083302
- [46] Anderson J A, Antonaglia J, Millan J A, Engel M, Glotzer S C 2017 *Phys. Rev. X* **7** 021001

Effects of allowing temporary overlaps during compression on packing density and configuration of hard particle systems*

ZHANG Shuchen WAN Duanduan[†]

(School of Physics and Technology, Wuhan University, Wuhan 430072, China)

(Received 25 April 2025; revised manuscript received 29 May 2025)

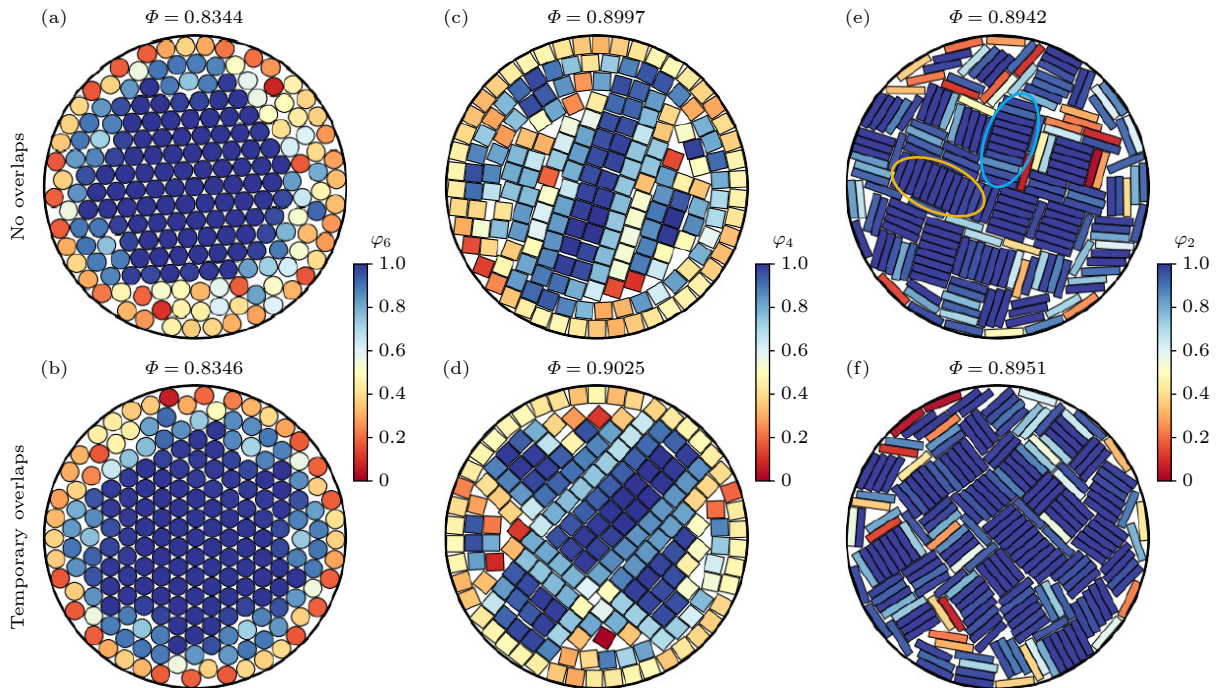
Abstract

The dense packing of hard particles in confined spaces has sparked widespread interest in mathematics and statistical physics. It relates to classical packing problems, plays a central role in understanding the self-assembly of microscopic particles such as colloids and nanoparticles under geometric constraints, and inspires studies on a wide range of physical systems. However, achieving high packing densities under confinement

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12274330) and the Knowledge Innovation Special Program of Wuhan-Shuguang, China (Grant No. 2022010801020125).

[†] Corresponding author. E-mail: ddwan@whu.edu.cn

remains challenging due to anisotropic shapes of particles, the discontinuous nature of hard-core interactions, and geometric frustration. In this work, we develop a Monte Carlo scheme that combines boundary compression with controlled temporary particle overlaps. Specifically, during the compression of a circular boundary, we allow a limited number of overlaps which are then removed before further compression steps. We apply this strategy to three types of two-dimensional particles—disks, squares, and rectangles with an aspect ratio of 5:1—confined within a circular boundary. As a control, we also perform simulations using a traditional method that strictly prohibits overlaps throughout. The final configurations from both methods exhibit similar structural features. For hard disks, central particles form a triangular lattice, while those near the boundary become more disordered to accommodate the circular geometry. For hard squares, particles in the center organize into a square lattice, whereas those near the boundary form concentric layers. For rectangles, particles in the central region display local smectic-like alignment within clusters that are oriented nearly perpendicular to each other. Near the boundary, some particles align tangentially along the circular edge. Quantitatively, the temporary-overlap strategy consistently yields denser packing across all particle types. The analysis shows that the average packing density and maximal packing density of 10 independent samples obtained from the above strategy are higher than those from the traditional method. Further analysis of the radial distribution functions and orientational order parameters reveals that although both methods produce similar structural features, the overlap-allowed method yields a larger central region exhibiting lattice-like or cluster-like ordering. Our findings suggest that allowing temporary particle overlaps is an effective strategy for generating dense configurations of hard particles under confinement. This approach may be extended to more complex systems, including three-dimensional particles or mixtures of particles of different shapes confined within restricted geometries.



Keywords: hard particles, overlap, packing density, configuration

PACS: 64.75.Yz, 47.57.J-, 05.40.Jc, 61.46.Hk

DOI: [10.7498/aps.74.20250552](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250552)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250552](https://cstr.net/urn:urn:cnki:32037.14.aps.74.20250552)

压缩过程中允许临时重叠对硬质颗粒体系密排密度及构型的影响

张书琛 万端端

Effects of allowing temporary overlaps during compression on packing density and configuration of hard particle systems

ZHANG Shuchen WAN Duanduan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 166404 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250552

CSTR: 32037.14.aps.74.20250552

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250552>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

振动驱动下双分散硬球颗粒堆积的结构

Structures of binary hard-sphere packing under tapping

物理学报. 2025, 74(13): 134502 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250232>

基于X射线CT成像技术振动条件下的“六足”凹体颗粒堆积结构实验

X-ray tomography based experimental study on packing structure of “hexapod” concave particles under external tapping

物理学报. 2025, 74(13): 134501 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250231>

Ti-V-Ta多主元合金辐照位错环形成的级联重叠模拟

Cascade overlap simulation of formation of dislocation loops in Ti-V-Ta multi-principal element alloy

物理学报. 2024, 73(22): 226102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241074>

准二维湿颗粒体系融化过程中的结构与缺陷

Structure and defects in melting process of quasi-two-dimensional wet particle system

物理学报. 2021, 70(11): 116401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202037>

铜氧化层上钒酞菁分子的吸附构型及组装结构

Adsorption configuration and assembly structure of vanadyl phthalocyanine molecule on copper oxide layer

物理学报. 2024, 73(12): 120704 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240043>

超音速高密度喷流对撞过程中的高效能量转移

Efficient energy transition from kinetic to internal energy in supersonic collision of high-density plasma jets from conical implosions

物理学报. 2022, 71(15): 155201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220361>