

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРИМЕСЕЙ В НАНООБЪЕМАХ.

Бабарин С.С.

Московский Государственный Технологический Университет «СТАНКИН»,
ф-т Информационных технологий, каф. «Прикладная математика»,
Россия, 127944, г. Москва, Вадковский пер., 3А,
Тел: (095) 973-30-76, 973-30-66,
E-mail: sercep@mail.ru

Исследования неравновесных процессов в области нанотехнологий являются одним из приоритетных направлений в математическом моделировании современной прикладной математики с использованием методов вычислительной физики. Новые задачи, связанные с учетом свойств материалов, а также наличием нелинейных квантовых эффектов требуют разработки новых подходов, расширяющих существующие модели для анализа эволюции системы частиц.

В основе современных математических моделей, рассматривающие молекулярные и атомные взаимодействия, используются потенциалы связанных и несвязанных взаимодействий с периодическими граничными условиями, что успешно применяется при исследованиях физико-химических и термодинамических свойств молекулярных систем, помещенных в среду [1,2]. Однако для моделирования процесса переноса примесей в замкнутых объемах необходимо принимать во внимание взаимодействия частиц со стенкой, а также наличие нелинейных эффектов, в частности силы Казимира в условиях геометрических ограничений. Решение данной задачи позволит обобщить и применить результаты вычислительных экспериментов для прикладных задач в области нанотехнологий.

Построенная математическая модель учитывает множественные вклады в энергию взаимодействия частиц с внутренней поверхностью физически ограниченных нанообъемов, а также учитывается действие силы Казимира как проявление запаздывающих и незапаздывающих Ван-Дер-Ваальсовых взаимодействий частиц. Математическая модель для исследования заданной системы построена на системе уравнений Ньютона. Для решения данной системы используются методы молекулярной динамики и Монте-Карло.

Вычислительный эксперимент показал, что сила Казимира вносит вклад в общую потенциальную энергию системы и при определенных геометрических ограничениях может существенным образом влиять на устойчивость ковалентных связей, что позволит не только учитывать данный эффект при разработке и конструировании технических систем, но также использовать его в качестве управляющей силы при химических реакциях.

Литература.

1. *J.N.Israelachvili*. Intermolecular and Surface Forces. - Academic Press, 2002, p.450
2. *D.W.Heerman*. Computer Simulation Methods. – John Wiley & Sons Ltd, 1999, p.146