

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ В РАЗРЯЖЕННОМ ГАЗЕ НА ПРИМЕРЕ КСЕНОНА<sup>1</sup>

Б. Батгэрэл, А.Ю. Дидык, В.В. Ленивенко, Э.Г. Никонов, И.В. Пузынин,  
Т.П. Пузынина

Объединенный Институт Ядерных Исследований,  
Лаборатория Информационных Технологий,  
Россия, 141980, г. Дубна, Московская область,  
Тел.: +7(49621) 65-059 , факс +7(49621) 65- 146,  
E-mail: post@jinr.ru

Целью данной работы является исследование процессов формирования нанокластеров в газе. Изучено влияние различных температурных режимов на процесс образования и эволюции нанокластеров ксенона (Xe).

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование основано на представлении объектов моделирования в виде системы взаимодействующих частиц (атомов или молекул). Эволюция системы происходит в результате движения этих частиц. Координаты частиц в каждый последующий момент времени вычисляются посредством интегрирования уравнений движения, в которые входят потенциалы взаимодействия частиц между собой и внешней средой. В данной работе компьютерное моделирование проводилось с использованием пакета программ LPMD[1]. Схема получения пучков изображена на рисунке (Рис.1). Для моделирования использовалась следующая конфигурация. В начальный момент времени  $t=0$  10648 атомов Xe равномерно размещались в кубе с геометрическими размерами  $a=19,8$  нм. Расчеты производились до момента времени  $t=1.5$ нс. В результате МД моделирования была установлена зависимость массовых распределений образующихся нанокластеров от задания скорости изменения температуры системы (Рис. 2).

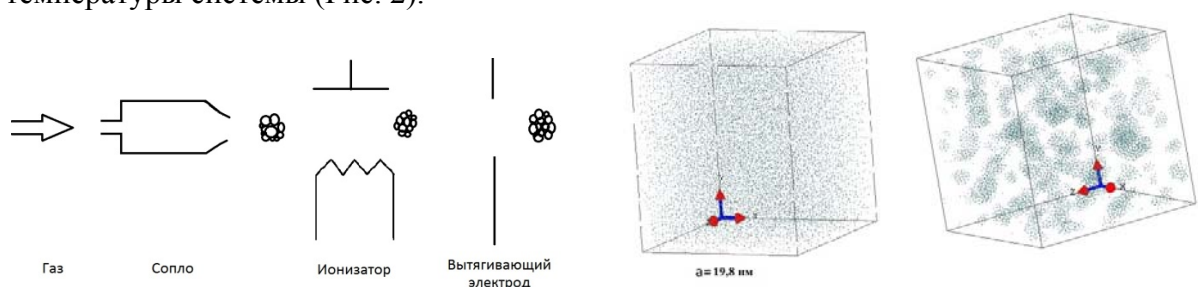


Рис.1.Схема получения газовых нанокластеров. Рис.2.Моделирования кластеров Хе.

## Литература.

[1] S. Davis, C. Loyola, F. Gonzalez, J. Peralta, // JCPC 181(2010) 2126-2139.

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 12-01-00396а