

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ КЛАСТЕРОВ И НАНОЧАСТИЦ НА СЛОЖНЫХ СТРУКТУРАХ

Уварова Л.А., Лапушкина Л.И.¹, Смирнова М.А.², Манин А.В.

Московский Государственный Технологический Университет «СТАНКИН», Россия,
127994, Москва, Вадковский пер. 3а, (499)972-95-20, uvar11@yandex.ru

¹Лицей при МВТУ им. Баумана, Россия, Москва

²Тверской Государственный Технический Университет, Россия, Тверь

Моделирование переноса кластеров и наночастиц в различных системах и структурах является одной из актуальных современных проблем. Эта задача возникает в таких областях как управление, наноэлектроника, физика дисперсных систем, медицина и др. В настоящей работе мы рассматриваем перенос кластеров и наночастиц, которые моделируются сферами с эффективными радиусами (методы расчета эффективных радиусов приведены, например, в [1]), на графах. Действительно, очень малые размеры таких частиц позволяют им проникать в тонкие разветвленные структуры, которые могут быть представлены в виде графов. В настоящей работе использовались как математические методы, применяемые для описания процессов переноса на графах, которые были развиты в монографии [2], так и метод молекулярной динамики при задании соответствующих потенциалов (Леннарда – Джонса и других, [3]). В частности, было показано, что для водных кластеров с реальной плотностью (найденной квантовыми методами, [4]), осаждение на поверхность выделенного направления происходит более быстро, чем для кластеров соответствующего диаметра, но с объемной водной плотностью. Рассматривался также перенос наночастиц с магнитными свойствами. При этом расчеты методом молекулярной динамики по определению скорости и траектории проводились для наночастиц с реальными характеристиками, взятыми из экспериментальной работы [5].

Работа поддержана РФФИ (грант № 09-01-00292-а).

Литература

1. Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. - Наука, 1991.
2. Покорный Ю.В., Пенкин О.М., Прядиев В.Л., Боровских А.В., Лазарев К.П., Шабров С.А. Дифференциальные уравнения на геометрических графах. – Физматлит, 2004.
3. Uvarova L.A., Kazarova T.V., Vnukova K.V. Mathematical modeling of clusters and nanoparticles transport in narrow tubes// *European Aerosol Conference*, Karlsruhe, Abstract T033A07, 2009.
4. Nadykto A.B., et.al.//*Physical Review Letters*, 96, 2006, 125701-4.
5. Hironori Iida, Kosuok Takayanagia, Takuya Nakanishib, Tetsuya Osakaabl. Synthesis of Fe₃O₄ nanoparticles with various sizes and magnetic properties by controlled hydrolysis // *Journal of Colloid and Interface Science* 314, 2007. Pp. 274-280