

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА НАНОЧАСТИЦ В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ УСЛОВИЯХ С УЧЕТОМ КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТОВ

Парфентьев Е.А.

Московский государственный технологический институт «Станкин», Москва, 127994,
Вадковский пер, 3., Кафедра Прикладной математики, E-mail: e.parfentiev@gmail.com

Поводом к написанию данной работы послужила статья об эксперименте в Антарктиде [1], в ходе которого исследователи A.Donateo, D.Contini, F.Belosi, F.M.Grasso, G.Santachiara and F.Prodi проводили замеры количества наночастиц, пролетающих в воздухе Антарктики, которая считается одним из самых экологически чистых мест нашей планеты.

Современное развитие нанотехнологий говорит о больших перспективах и применении различных разработок из этой области в реальной жизни.

Сегодня исследования в данном направлении приобретают особую актуальность в свете стратегии развития деятельности РФ в Антарктике на период до 2020г. и на более отдаленную перспективу.

Цель работы - построение математической модели движения наночастиц в низкотемпературных условиях с учетом квантовых эффектов, соответствующее компьютерное моделирование взаимодействия наночастиц, а также подсчет концентрации наночастиц в воздушном потоке и сравнение результатов с реальными данными.

Основное внимание уделено моделированию процесса осаждения наночастиц. Рассматриваются различные методы и учитываются специфика исследуемых частиц. Наличие экспериментальных данных [1] позволяет судить о точности выбранной модели.

Для выполнения вычислительного эксперимента было разработано программное обеспечение, основанное на методе молекулярной динамики с использованием алгоритма Верле и изменениями, которые вносят в процесс моделирования квантовые эффекты. В ходе вычислительного эксперимента были получены данные, которые сравнивались с реальными. Несмотря на допущения, результаты можно назвать адекватными реальным, а используемое ПО, доработанное соответствующим образом, – годным для проведения аналогичных экспериментов.

Литература

1. *A.Donateo, D.Contini, F.Belosi, F.M.Grasso, G.Santachiara and F.Prodi, Measurements of concentrations and deposition velocity of ultrafine aerosol over the Nansen Ice Sheet (Antarctica) // European Aerosol Conference, Karlsruhe, Abstract T160A03, 2009*