

Исследование многофазных систем методом молекулярной динамики

Латышева Татьяна Аркадьевна

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: fml1580@gmail.com

Современная вычислительная техника дает возможность с помощью компьютерного моделирования решать недоступные для аналитического решения задачи на микроскопическом уровне. Компьютерная молекулярная динамика является одним из наиболее мощных вычислительных методов, эффективно применяемых для моделирования физических, химических и биологических систем.

С помощью данного метода было проведено исследование трехфазной системы, представляющей собой наноклапю на твердой поверхности в газе. В качестве газа и жидкости было взято одноатомное вещество аргон. Взаимодействие частиц описывалось с помощью потенциала Леннарда-Джонса:

$$u(r_{ij}) = 4\epsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6\right)$$

Варьировались параметры межфазного взаимодействия, далее изучалась получавшаяся после установления равновесия система. Было определено, какие параметры соответствуют гидрофобной поверхности, а какие – гидрофильной.

Сейчас актуальной задачей является исследование образования нанопузырьков на гидрофобной поверхности, погруженной в воду. Опытным путем обнаружено, что такие пузырьки могут быть полезны с прикладной точки зрения: жидкости скользят свободнее вдоль поверхностей, если поверхность покрыта нанопузырьками. Для моделирования молекул воды использована CVFF модель со следующим потенциалом:

$$u = \sum_b K(b - b_0)^2 + \sum_b K(\theta - \theta_0)^2 + \sum_{ij} 4\epsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6\right) + \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{\epsilon r_{ij}}$$

Расчет с помощью метода молекулярной динамики позволит изучить природу нанопузырьков и разработать алгоритм стимулирования их образования.

Источники и литература

- 1) Диссертация Моисеевой Елены Флоридовны «Исследование взаимодействия нанопузырьков с твердой поверхностью методом молекулярной динамики».
- 2) Рапапорт Д. К. Искусство молекулярной динамики. – М. –Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский институт компьютерных исследований, 2012.
- 3) O. Buyukozturk, M.J. Buehler, D. Lau, C. Tuakta, Structural solution using molecular dynamics: Fundamentals and a case study of epoxy-silica interface, Int. J. Solids Struct. Vol. 48, pp. 2131-2140, April 2011.

Слова благодарности

Выражаю благодарность Ковалеву Валерию Леонидовичу и Якунчикову Артему Николаевичу за содействие и наставления