

УДК 539.2:544.723

© А. А. Вахрушев
makaveli.lcf@gmail.com

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОТЕЧЕНИЙ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ¹

Ключевые слова: нанотехнологии, неньютоновские жидкости, тепло-массообмен.

Abstract. Article considers numerical simulation of micro- and nanoflows using approaches of molecular dynamics.

Введение

Исследования молекулярных течений важны во многих областях науки и практики: медицине, электронике, при создании новых материалов, в нанотехнологиях и так далее. Представленные результаты являются частью программы фундаментальных исследований течения жидких неньютоновских сред при наличии в них частиц К-фазы. Программа предполагает создание методики получения макрохарактеристик материалов численными методами, что позволит заменить дорогостоящий натурный эксперимент вычислительным.

§ 1. Определяющие уравнения

Моделирование движения среды методами молекулярной динамики предполагает решение уравнений движения, определяемых вторым законом Ньютона. Результирующая внешняя сила,

¹Грант РФФИ N 05-08-50090-а.

действующая на рассматриваемый атом, вычисляется как производная от некоторой потенциальной функции $\Phi(\vec{r})$, где \vec{r} – вектор координат атомов. Суммарный потенциал Φ_{total} взаимодействия молекулярной системы может быть записан в виде [1]

$$\Phi_{total} = \Phi_{vdW} + \Phi_{elst} + \Phi_{bond} + \Phi_{angle},$$

где Φ_{vdW} – потенциал Ван-дер-ваальсовых сил; Φ_{elst} – описывает кулоновское взаимодействие; Φ_{bond} – соответствует ковалентным связям в системе; Φ_{angle} – угловой потенциал между парой ковалентных связей, имеющих в вершине общий атом.

Моделирование потока на молекулярном уровне [2] в корне отличаются от аналогичных задач в области механики сплошной среды. Предложенная методика основывается на моделировании перепада давления ΔP [3]:

$$\Delta P = P_1 - P_0 = \frac{n \cdot f}{S}, \quad (1.1)$$

где n – число атомов в граничном слое; f – сила, прикладываемая к каждому атому, проходящему через граничный слой; S – площадь. Соотношение (1.1) было использовано наряду с периодическими граничными условиями.

§ 2. Результаты расчетов

При проведении расчетов рассматривалась многокомпонентная среда: в водный раствор помещался кристалл соли NaCl. Наряду со свободным течением исследовался поток между двух углеродных пластин или в замкнутом контуре.

Был рассчитан молекулярный поток через границы периодической ячейки. На рис. 2.1 представлены графики его изменения в зависимости от шага по времени: максимальная величина достигается при свободных границах области; наличие твердых стенок снижает скорость движения среды за счет сил вязкого трения; при течении в замкнутом контуре моделируемого перепада давления не достаточно для развития течения.

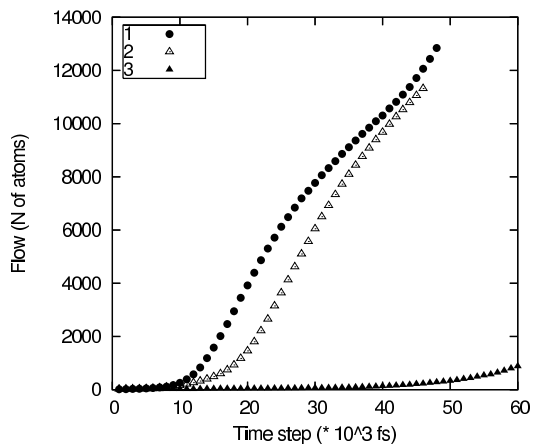


Рис. 2.1: Поток через область интегрирования: 1 – свободные границы; 2 – две бесконечные пластины; 3 – замкнутый контур

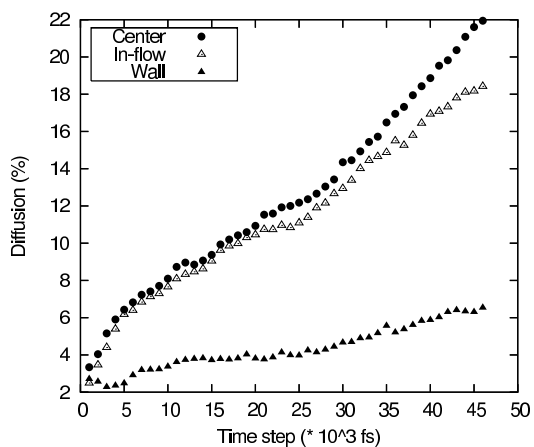


Рис. 2.2: Диффузия молекул жидкости из различных слоев в основной поток: 1 – из центральной части потока; 2 – из среднего слоя; 3 – в пристеночной области

Проведены исследования механизма перемешивания молекулярной жидкости. Рис. 2.2 отображает степень проникновения молекул вещества из трех равномерно распределенных в начальный момент времени слоев. В центральной области за счет больших скоростей и в результате обтекания частицы К-фазы рассматриваемая величина существенно больше по сравнению с ее значениями в пристеночной области. Эффект также объясняется «прилипанием» жидкости к твердой поверхности.

Заключение

Были проведены тестовые расчеты параметров нанопотока с использованием методов молекулярной динамики. Поля осредненной скорости показывают, что движение атомов достаточно хаотичное, но в целом жидкость движется в моделируемом направлении. Были получены величины молекулярного потока и диффузии в различных слоях моделируемой среды.

Автор выражает благодарность за плодотворное сотрудничество академику РАН Липанову Алексею Матвеевичу и д.ф.-м.н Вахрушеву Александру Васильевичу.

Список литературы

1. James C. Phillips, Rosemary Braun, Wei Wang et al. Scalable Molecular Dynamics with NAMD // Journal of Computational Chemistry. 2005. Vol. 26, №16.
2. Robert E Tuzuny, Donald W Noidy, Bobby G Sumptery and Ralph C Merkle. Dynamics of fluid flow inside carbon nanotubes // Nanotechnology. №7 (1996). P. 241–246.
3. Emad Tajkhorshid, Jordi Cohen, Aleksij Aksimentiev, Marcos Sotomayor, and Klaus Schulten. Towards understanding membrane channels // Bacterial ion channels and their eukaryotic homologues. Washington, DC: ASM Press, 2005. P. 153-190.