

МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КАПЕЛЬНОГО РЕАКТОРА ПРИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ СИНТЕЗЕ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Жукалин Д.А.

Воронежский государственный университет, Россия, 394018, Воронеж,
Университетская пл. 1, +7-951-568-52-50, E-mail: d.zhukalin@mail.ru

Открытые диссипативные системы в последнее время привлекли внимание многих исследователей самых разных областей. К таким системам все больше относятся не как к экзотическим явлениям, а как к инструменту, позволяющему решать сложные задачи не только в изучении фундаментальных видов взаимодействия различной природы, но и технологических приложениях [1]. Открытые системы интересны тем, что, в отличие от закрытых систем, при определенном взаимодействии с окружающей средой в них может наблюдаться отклонение от состояния равновесия как в микроскопическом, так и макроскопическом масштабах.

Одним из примеров открытой системы является капля испаряющейся жидкости [2]. Капельные методики широко применяются в задачах медицинской диагностики, сепарации растворенных компонент, синтезе наноматериалов и других областях [3].

Для моделирования динамики высыхающей капли использовался ансамбль из 1000 молекул воды, связанных между собой потенциалом Леннарда-Джонса. В качестве подложки, которая играет роль граничных условий, выступает слой графена.

Для моделирования взаимодействия молекулярной системы с окружающей средой использовался термостат Нозе-Хувера. Термостат предполагает возможность диссипации энергии, таким образом, обеспечивая открытость системы. Поэтому полная энергия внутри открытой молекулярной системы не сохраняется. Термостат поддерживает значение температуры на определенном уровне, а по характеру изменения потенциальной энергии можно судить о наличии изменений в системе (фазовые переходы, изменение энтропии и др.).

В результате в настоящей работе была разработана молекулярно-кинетическая модель гидродинамической неустойчивости в испаряющейся капле, адаптированная под условия открытой системы.

В результате численного эксперимента установлены реакционно-активные центры в капельном реакторе, характеризующиеся локальным перераспределением кинетической и потенциальной энергии, способствующие локальному сближению молекул в условиях низкотемпературного синтеза.

Литература

1. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов // Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». – 2001. - 160 с.
2. Barash L.Yu. Marangoni convection in an evaporating droplet: Analytical and numerical descriptions // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 102, 2016, pp. 445-454
3. Жукалин Д.А. Капельный реактор в нанотехнологиях. Конденсированные среды и межфазные границы № 20, 2018, с. 66-74.