

УДК 519.6

О. А. Калущков, Л. А. Уварова

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ С МАЛЫМИ ДИСПЕРСНЫМИ ЧАСТИЦАМИ РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ И ИХ ДИНАМИКИ

Предложена модель взаимодействия электромагнитных волн с малыми частицами и кластерами в случае, когда диэлектрическая проницаемость рассматриваемого материала зависит одновременно от напряженностей электрического и магнитного полей. Рассмотрен класс решений дифференциальных уравнений, полученных в рамках модели и позволяющих учитывать геометрическую структуру малых дисперсных частиц или кластеров. Методами молекулярной динамики исследованы движение и осаждение кластеров воды в узких трубках.

Ключевые слова: математическое моделирование, электромагнитное поле, дифференциальные уравнения на графах, кластеры, наночастицы, методы молекулярной динамики.

Проблемы, связанные с динамикой и сопутствующими процессами в системе наночастиц и кластеров, весьма актуальны в настоящее время. Сами нанокластеры в общем случае могут иметь произвольную форму. Вместе с тем для кластеров и их скоплений геометрическая форма имеет большое значение.

Механизмы формообразования кластеров могут быть различны: испарение, зародышеобразование, коагуляция, термическое разрушение под воздействием тепловых источников электромагнитной природы и другие механизмы.

Как правило, для математического описания кластерных систем, состоящих из частиц идеальной формы (сферическая, цилиндрическая, эллипсоидная), используются классические методы дифференциального и интегрального исчисления. При необходимости рассмотрения частиц сложной формы могут использоваться различные методы: метод возмущения при небольшом отклонении формы частицы от идеальной, определение фрактальной размерности и другие. Размеры кластеров или их скоплений могут быть определены при помощи вспомогательных методов квантовой химии (например, с помощью теории функционала плотности).

В данной статье мы рассматриваем подход, позволяющий учесть геометрию наночастиц или кластеров и их динамику в наносистемах. Он сочетает теорию дифференциальных уравнений на графах, квантово-химические методы и методы молекулярной динамики.

Взаимодействие электромагнитного поля с малыми дисперсными частицами и кластерами. Представляет интерес вопрос взаимодействия с кластерами внешних магнитных и электрических полей, что, в свою очередь, связано с вопросами управления и динамики кластеров в различных средах.

Для описания амплитуд электрического и магнитного векторов рассмотрим следующие уравнения:

$$\Delta \vec{E}_i + k^2 \varepsilon_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}, H_{i1}, H_{i2}, H_{i3}) \vec{E}_i = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}_i); \quad (1)$$

$$\Delta \vec{H}_i + k^2 \varepsilon_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}, H_{i1}, H_{i2}, H_{i3}) \vec{H}_i = \nabla k_{li} \times \vec{E}_i; \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (k_{li} \cdot \vec{E}_i) = 0; \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \vec{H}_i = 0, \quad (4)$$

где $i = 1, 2$; $k = \frac{\omega}{c}$; $k_{li} = ik_i \varepsilon_i$; ε - комплексная диэлектрическая проницаемость, $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$, $\varepsilon = \varepsilon(E_1, E_2, E_3, H_1, H_2, H_3)$; ω - частота электромагнитной волны; c - скорость света. В общем случае $\varepsilon' = \varepsilon'(E_1, E_2, E_3, H_1, H_2, H_3)$, $\varepsilon'' = \varepsilon''(E_1, E_2, E_3, H_1, H_2, H_3)$, i - номер отдельных частей гетерогенного кластера.

Уравнения (1–4) записаны для амплитуд электрического и магнитного векторов. Они получены из системы уравнений Максвелла в предположении, что $\vec{E} \sim e^{-i\omega t}$, $\vec{H} \sim e^{-i\omega t}$, где t - время. Такое рассмотрение возможно для случая относительно больших кластеров, когда применимы физические подходы для описания структур мезоразмеров.

Кластеры можно схематично представить в виде графов или псевдографов различных видов. Тогда мы приходим к необходимости рассмотрения дифференциальных уравнений на графах. Такие методы развивались, например, в работе [1].

В работе [2] были получены некоторые точные решения системы (1)– (4) при рассмотрении зависимости диэлектрической проницаемости наноматериала только от напряженности электрического поля. При этом накладывалось дополнительное условие на диэлектрическую проницаемость: $\varepsilon_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}) = 0$. В настоящей работе мы учитываем зависимость диэлектрической проницаемости как от электрического, так и от магнитного вектора. В качестве дополнительного условия рассматривается следующее:

$$\varepsilon_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}, H_{i1}, H_{i2}, H_{i3}) = 0. \quad (5)$$

Если представить вектор \vec{E} в виде $\vec{E}_i = \nabla \varphi_i$, то из системы (1-5) получим

$$\varepsilon_i \left(\omega \left| \frac{1}{h_1} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_1}, \frac{1}{h_2} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_2}, \frac{1}{h_3} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_3}, H_{i1}, H_{i2}, H_{i3} \right. \right) = 0, \quad (6)$$

где h_k - метрические коэффициенты; $k=1, 2, 3$, $\varphi_i = \varphi_i + i\varphi_i$.

В случае квадратичной зависимости диэлектрической проницаемости материала от вектора напряженности электрического поля ($\varepsilon(\vec{E}) = \varepsilon_0 - |\alpha| \cdot |\vec{E}|^2$) и линейной зависимости от вектора напряженности магнитного поля ($\varepsilon(\vec{H}) = |\beta| \cdot |\vec{H}| + |\delta|$, что, например, справедливо для магнитореологических эластомеров) уравнение (6) принимает следующую форму:

$$\frac{1}{h_1^2} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_1} \right)^2 + \frac{1}{h_2^2} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_2} \right)^2 + \frac{1}{h_3^2} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_3} \right)^2 = \frac{\varepsilon_{i0} - |\delta_i| - |\beta_i| \cdot |\vec{H}_i|}{|\alpha_i|}. \quad (7)$$

Уравнения (6) и (7) справедливы для стратифицированного множества. Учитывая это, а также сложность структуры, содержащей кластеры, мы получим выражение для градиента потенциала в следующем виде:

$$\nabla \varphi = \frac{1}{\sqrt{h_{\alpha\alpha}}} \frac{\partial(\varphi)}{\partial x^\alpha} \vec{e}_\alpha + \sum_{\sigma_{kj} > \sigma_{k-1i}} \vec{v}_{kj} \vec{E}_{kj}, \quad (8)$$

где σ_{kj} - страт; $\sigma_{kj} \succ \sigma_{k-1i}$ означает, что σ_{k-1i} примыкает к σ_{kj} ; \vec{v} - нормальный вектор.

Из уравнений (7) и (8) можно получить решение для вектора напряженности \vec{E} . Соответственно для вектора напряженности \vec{H} из системы уравнений (1-5) получается уравнение Лапласа, что приводит к решению в виде суммы гармонических функций для каждого выделенного направления наноструктуры.

Динамика кластеров в наносистемах. Также важной задачей является рассмотрение динамики кластеров в выбранном направлении. Для этого могут быть использованы численные методы, например метод молекулярной динамики с применением схемы Метрополиса.

В настоящей работе рассматривался перенос водных кластеров методом молекулярной динамики с применением алгоритма Верле. При этом для плотности кластера использовались данные работы [3]. В указанной работе посредством квантово-химических методов при помощи современных пакетов прикладных программ Gaussian, Gromacs, NupercChem получены значения плотности для малых кластеров воды. В работе рассматривались водные кластеры $(H_2O)_n$ ($n=2\dots 10$) и было показано, что соотношение ρ / ρ_0 (ρ - плотность кластера, ρ_0 - плотность жидкости) изменяется от 0,93 (при $n=2$) до 1,45 (при $n=10$). В таблице представлены результаты численных экспериментов по динамике таких кластеров. В числителе дроби записано количество движущихся частиц, а в знаменателе – количество осажденных. Передвижение частиц происходит в тонкой конической трубке (диаметром 10 – 12 нм). Знаменатель дроби увеличивается с возрастанием длины траектории движения и количества частиц в трубке. Сравнение с осаждением кластеров таких же размеров, но с плотностью как у воды с объёмными свойствами показало, что оно идёт быстрее для $n>2$.

Таблица

Пример перемещения и осаждения водных кластеров при $n=10$

Количество частиц	Количество экспериментов	Длина траектории движущихся внутри трубки частиц, нм		
		10	100	1000
3	50	51/99	9/141	0/150
4	50	59/141	13/187	0/200
5	50	72/178	22/228	2/248

Такой подход, сочетающий квантово-химические методы для определения структуры и термодинамических характеристик кластеров с методами молекулярной динамики для описания их движения в наносистемах, может быть применим для кластеров с различными физическими свойствами. Отметим, что при рассмотрении динамики малых кластеров в электромагнитных полях возникает необходимость учета зависимости диэлектрической проницаемости вида $\varepsilon_i = \varepsilon_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}, H_{i1}, H_{i2}, H_{i3}, n)$, где n - число молекул в кластере [4].

Итак, предложена модель взаимодействия электромагнитных волн с малыми частицами и кластерами в случае, когда диэлектрическая проницаемость рассматриваемого материала зависит одновременно от напряженностей электрического и магнитного полей.

Методами молекулярной динамики исследованы движение и осаждение кластеров воды в тонких конических трубках. Было выяснено, что рассмотренные наночастицы осаждаются на поверхности быстрее, чем кластеры соответствующих размеров, обладающие

плотностью, равной по величине плотности воды, что объясняется учётом реальной структуры кластеров.

Развиваемый подход, учитывающий реальные физические характеристики кластеров и влияние на них электромагнитных полей, может быть использован в задачах управления в наносистемах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Покорный, Ю.В. Дифференциальные уравнения на геометрических графах / Ю. В. Покорный, О. М. Пенкин, В. Л. Прядиев, А. В. Боровских, К. П. Лазарев, С. А. Шабров. - М.: Физматлит, 2005. – 272 с.
2. Uvarova, L.A. Some exact solutions of non-linear electrodynamics equations / L.A. Uvarova // 16th National congress of Australian Institute of Physics. - 2005. - 207 p.
3. Nadykto, A.V. Quantum Nature of the Sign Preference in Ion-Induced Nucleation / A.V. Nadykto // Physical Review Letters, 125701-4,96. - 2006.
4. Романова, Е.Ю. Математическое моделирование структуры и процессов взаимодействия электромагнитного излучения с некоторыми типами мезо- и нанообъектов: автореф. дис. ...канд. физ.-мат. наук / Е.Ю. Романова. - М., 2007. – 22 с.

Материал поступил в редколлегию 18.07.14.