

COMPUTER MODELING OF INTERACTING METAL NANOPARTICLES WITH SUBSTRATE

S. Polyakov^{1,*}, *V. Podryga*^{1,2}, *N. Tarasov*¹

¹Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow

²Moscow Automobile and Road Construction
State Technical University, Moscow

Spraying the nanoparticles on a substrate is an actual and promising technology in many industries. The theoretical study of this process in various conditions is often implemented using computer modeling. A comprehensive methodology for modeling spraying processes is presented. The methodology is based on direct atomic-molecular calculations. Parallel technologies are used for the computer implementation of the methodology, which allow obtaining results with a given level of resolution and accuracy. Various aspects of the developed technology and computation results are discussed on the example of the interaction of nanoparticles consisting of nickel atoms with a substrate.

Напыление наночастиц на подложку является актуальной и перспективной технологией во многих отраслях промышленности. Теоретическое исследование этого процесса в различных условиях часто реализуется с помощью компьютерного моделирования. Представлена комплексная методика моделирования процессов напыления. Основу методики составляют прямые атомно-молекулярные расчеты. Для компьютерной реализации методики применяются параллельные технологии, позволяющие получать результаты с заданным уровнем разрешения и точности. Различные аспекты разработанной технологии и результаты расчетов обсуждаются на примере взаимодействия наночастиц, состоящих из атомов никеля, с подложкой.

PACS: 89.20.Ff; 07.05.Tr

* E-mail: polyakov@imamod.ru