

Герасимов Александр Михайлович, к. ф.-м. н., с.н.с., лаборатория сенсорики, доцент, каф. «Оптоинформатика», [gerasimovam@susu.ru](mailto:gerasimovam@susu.ru).  
Ассельборн Сергей Александрович, к. ф.-м. н., с.н.с., лаборатория сенсорики, [aborn@mail.ru](mailto:aborn@mail.ru).

УДК 536.7

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ МАКРОПАРАМЕТРОВ ДИФфуЗИОННОГО ДВИЖЕНИЯ СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛ В МИКРОФЛУИДНЫХ СИСТЕМАХ

Д.Д. Самохин

«Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва», г. Самара

**Ключевые слова:** микрофлюидные системы, диффузионное движение, сложные молекулы

Микрофлюидные системы находят широкое применение в различных областях, таких как медицина, биотехнология, электроника, аналитическая химия и другие [1]. Одним из ключевых параметров, определяющих эффективность работы таких систем, является диффузионное движение сложных молекул внутри каналов и камер микроустройств [2]. Для моделирования подобных процессов можно использовать как методы, описывающие поведение отдельных частиц, например метод молекулярной динамики, так и методы, использующие приближение сплошной среды. Недостатками методов, базирующихся на приближении сплошной среды, является необходимость введения в рассмотрение интегральных коэффициентов, описывающих свойства среды, например коэффициента вязкости и коэффициента диффузии, значения которых определяются экспериментально и не всегда могут быть получены с достаточной точностью [2]. Использование методов, описывающих поведение отдельных частиц не требует введения дополнительных коэффициентов, описывающих систему на макроуровне, однако их использование существенно ограничено высокими требованиями к вычислительным ресурсам, что делает невозможным описание сравнительно больших систем, например микрофлюидных систем в целом.

В данной работе предлагается использовать молекулярно-динамическое моделирование [3-4] поведения сложных молекул в потоке флюида для вычисления значения интегральных коэффициентов, описывающих систему на макроуровне, таких, как коэффициент диффузии и коэффициент динамической вязкости. Предварительный расчет таких параметров необходим для более точного моделирования процессов в

макроскопических системах с использованием методов, основанных на приближении сплошной среды.

В рамках исследования были изучены возможности метода молекулярной динамики для моделирования движения сложных молекул в условиях, характерных для микрофлюидных систем, разработаны методики расчета макропараметров системы, в частности, коэффициента диффузии.

Проведен ряд численных экспериментов, в частности, с помощью предложенного метода рассчитан коэффициент диффузии метана в аргоне. Моделирование проводилось с помощью пакета ПО для молекулярно-динамического моделирования LAMMPS [4].

Список использованных источников

1. Allen M.P., Computer simulation of liquids / Allen M.P., Tildesley D.J. // Oxford University Press. – 2017.

2. Frenkel D., Understanding molecular simulation: from algorithms to applications / Frenkel D., Smit B. // Academic Press. – 2018.

3. Liu Y., Effect of molecular structure on the diffusion behavior of polymers in nanoslit confinement / Liu Y., Chen Y., Liu Y., Yang Y., Cai Y. // The Journal of chemical physics – 2016.

4. Karniadakis G.E., Microflows and nanoflows: fundamentals and simulation / Karniadakis G.E., Beskok A., Aluru N.R. // Springer Science & Business Media. – 2010.

Научный руководитель: А.Н. Агафонов, к.т.н., доцент, каф. наноинженерии  
Самохин Денис Дмитриевич, студент гр. 6282-030401D, den9915111@gmail.com.

УДК 620.3; 004.94; 537

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ КЛЮЧЕВОГО РЕЖИМА РАБОТЫ ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА НА ОСНОВЕ НИТРИДА ГАЛЛИЯ**

И.Н. Козлова, А.А. Амелчук

«Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва», г. Самара

**Ключевые слова:** нитрид галлия, полевой транзистор, ключевой режим, моделирование.

Нитрид галлия является перспективным материалом для создания высокочастотных, теплостойких и мощных полупроводниковых приборов. Большая ширина запрещённой зоны означает, что работоспособность транзисторов из нитрида галлия сохраняется при более высоких температурах и напряжениях; а так же нитрид галлиевые транзисторы имеют более высокое быстродействие по сравнению с транзисторами на основе кремния [1]. В программном пакете для моделирования физических процессов COMSOL Multiphysics 6.0 с использованием модуля