

SUPERCOMPUTER MODELING OF INTERACTION PROCESSES OF DIFFERENT-MATERIAL METAL NANOCLUSTERS

S. Polyakov^{1,*}, *V. Podryga*^{1,2}, *N. Tarasov*¹,
I. Saifonov^{1,3}

¹ Keldysh Institute of Applied Mathematics, RAS, Moscow, Russia

² Moscow Automobile and Road Construction State Technical University,
Moscow, Russia

³ Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University),
Dolgoprudny, Russia

The study is devoted to modeling the processes of creating metal composites from nanoclusters of various materials by supersonic cold gas dynamic spraying. The relevance of the research is determined by the need to develop the appropriate mathematical apparatus and parallel software tools. The final stage of the process, when individual metal clusters interact with each other, is analyzed using methods of molecular dynamics. An example is the interaction of copper and nickel nanoclusters when creating a fragment of the chip's feed track. The results obtained confirmed the effectiveness of the developed parallel computing procedure.

Работа посвящена моделированию процессов создания металлических композитов из разноматериальных нанокластеров методом сверхзвукового холодного газодинамического напыления. Актуальность исследования обусловлена необходимостью развития соответствующего математического аппарата и параллельного программного инструментария. Методами молекулярной динамики анализируется финальная стадия процесса, когда отдельные металлические кластеры взаимодействуют между собой. Примером служит взаимодействие нанокластеров меди и никеля при создании фрагмента питающей дорожки чипа. Полученные результаты подтвердили эффективность разработанной параллельной вычислительной процедуры.

PACS: 89.20.Ff

* E-mail: polyakov@keldysh.ru, polyakov@imamod.ru