

ВЫЧИСЛЕНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ФУЛЛЕРЕНОВ В ЖИДКОСТИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Гайдук Е.Д.

Самарский государственный университет

В рамках метода классической молекулярной динамики [1] произведен расчет коэффициентов диффузии и вязкости фуллеренов в жидкости (бензоле) в зависимости от температуры наносuspензии. Взаимодействие молекул жидкости описывалось парным потенциалом Леннарда-Джонса. Используемый при расчетах эффективный потенциал фуллерен-молекула жидкости получен в предположении аддитивности взаимодействия молекул фуллерена и жидкости, при котором фуллерен рассматривается как жесткая частица. В результате моделирования были получены зависимости коэффициентов переноса от температуры и изучен характер этих зависимостей. Полученные результаты для коэффициента диффузии качественно согласуются с экспериментальными данными, приведенными в работе [2].

Литература

1. **Д.В.Хеерман** *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике.* /М.: Наука, Гл. ред. физ-мат. лит., 1990. 176с.
2. **В.Н.Безмельницын** *Фуллерены в растворах.* / В.Н. Безмельницын, А.В. Елецкий, М.В. Окунь // УФН. 1998. Т. 168. №11. С.1195-1220.

КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ОДНОГО ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С ОПЕРАТОРОМ БЕССЕЛЯ ПО ПРОСТРАНСТВЕННЫМ ПЕРЕМЕННЫМ

**Гарипов И.Б., Мавлявиев Р.М., Нурааниева С.М.,
Хусаинова Э.Д.**

Татарский государственный гуманитарно-педагогический университет

Пусть E_p^+ — часть евклидова пространства точек $x = (x_1, x_2, \dots, x_p)$, определенная неравенствами $x_i > 0$ ($i = \overline{1, p}$). Обозначим через $R_{p+1}^+ = \{(x, t) : x \in \overline{E_p^+}, t > 0\}$ — часть арифметического пространства точек (x, t) .