

**Министерство образования и науки РФ**  
**ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет»**

**Безносюк С.А., Жуковский М.С., Маслова О.А., Терентьева Ю.В.**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ  
ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ МАТЕРИАЛОВ**

**МОНОГРАФИЯ**

**Барнаул 2015 г.**

© Безносюк С.А., Жуковский М.С., Маслова О.А., Терентьева Ю.В. 2015

© ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет», 2015

Об издании – 1, 2

сведения об издании

УДК 541.128:004.414+539.2:004.414

ББК 24.544с51+22.3с51

К 637

Авторы: Безносюк С.А., Жуковский М.С., Маслова О.А., Терентьева Ю.В.

Рецензенты: В.В. Поляков – д. ф.-м.н., профессор АлтГУ  
В.А. Плотников – д. ф.-м.н., профессор АлтГУ

К 637 Компьютерное моделирование квантовых электромеханических систем материалов: монография [Электронный ресурс] / С.А. Безносюк, М.С. Жуковский, О.А. Маслова, Ю.В. Терентьева – Электрон. текст. дан. (4,5 Мб). – Барнаул: ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет», 2015. – 1 эл. оп. диск (CD-R). – Систем. требования: PCI, Intel Pentium, 1 ГГц; 256 Мб опер. памяти; 30 Мб свобод. диск. пространства; CD-ROM; ОС Windows XP И выше; Adobe Reader. – Загл. с экрана  
Монография

В монографии изложены результаты теоретических исследований компьютерных моделей прототипов квантовых электромеханических наносистем нанодотов и наноботов – квантовых элементов функциональных наномашин в различных материалах. В монографии изложены вопросы компьютерного моделирования строения, кинетики релаксации нанкопителей аттосекундных импульсов энергии на основе квантовых наноботов переходных металлов группы палладия. Дан анализ устойчивости нанодотов магнитных полупроводниковых соединений спинтроники на основе нанокристаллов арсенида галлия и его изоэлектронных аналогов типа  $A^{II}B^{IV}C^V_2$ , легированных марганцем.

Книга будет полезна для специалистов в области физической химии, материаловедения, нанoeлектроники и спинтроники, компьютерного моделирования наноматериалов, а также студентам, магистрантам и аспирантам соответствующих специальностей. Монография может быть использована в учебных программах: «Физическая химия полупроводников», «Химия и физика наносистем», «Нанофизика и нанoeлектроника», «Компьютерный наноинжиниринг», «Наноинжиниринг функциональных и биомиметических материалов».

© Безносюк С.А., Жуковский М.С., Маслова О.А., Терентьева Ю.В. 2015

© ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет», 2015

производственно-технические сведения

Редактор:

Верстка: Безносюк С.А., Жуковский М.С., Маслова О.А., Терентьева Ю.В.

Дата подписания к использованию: 29.10.2015

Объем издания: 4,5 Мб

Комплектация издания: 1 эл. оп. диск (CD-R).

Тираж 50 дисков

ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет»  
656049, Барнаул, ул. Ленина, 61

## Содержание

Введение

Библиографический список к введению

Глава 1. Накопители энергии аттосекундных импульсов на основе наноботов переходных металлов группы палладия.

1.1. Моделирование квантовой релаксации НЭМС Ru, Rh, Pd

1.2. Кинетика релаксации НЭМС наноботов Ru<sub>256</sub>, Rh<sub>256</sub>, Pd<sub>256</sub>

Библиографический список к главе 1

Глава 2. Компьютерное моделирование устойчивости нанослоев арсенида галлия и его изоэлектронных аналогов, легированных марганцем

2.1. Гетероструктуры магнитных полупроводников

2.1.1. Разбавленные магнитные полупроводники

2.1.2. Высокотемпературные ферромагнитные полупроводники

2.2. Компьютерное моделирование нанослоевых гетероструктур A<sup>III</sup>B<sup>V</sup>, допированных марганцем

2.2.1. Анализ результатов компьютерных экспериментов

2.3. Компьютерное моделирование нанослоев A<sup>II</sup>B<sup>IV</sup>C<sup>V</sup><sub>2</sub>, легированных марганцем, на примере ZnSnAs<sub>2</sub>

2.4. Компьютерное моделирование нанокинетики фемтосекундного процессинга нанослоев GaAs, легированных марганцем

Библиографический список к главе 2.

Заключение