

Министерство образования и науки РФ
Алтайский государственный университет

С. А. Безносюк, М. С. Жуковский,
С. В. Важенин, О. А. Маслова

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
КВАНТОВОЙ РЕЛАКСАЦИИ
НАНОСИСТЕМ**

Учебное пособие



Барнаул

Издательство
Алтайского государственного
университета
2013

УДК 541.1 (075.8)

ББК 24.5я73

Б 399

Рецензент:

доктор физ.-мат. наук, профессор В. В. Поляков (АлтГУ),
доктор физ.-мат. наук, профессор В. А. Плотников (АлтГУ)

Безносюк, С. А.

Б 399 **Компьютерное моделирование квантовой релаксации наносистем** [Текст] : учебное пособие / С. А. Безносюк, М. С. Жуковский, С. В. Важенин, О. А. Маслова. — Барнаул : Изд-во Алт. ун-та, 2013. — 116 с.

ISBN 978-5-7904-1497-8

Даны теоретические основы, справочные материалы, учебно-методические установки и формы тестового контроля знаний, необходимые для освоения лабораторного практикума по учебному курсу «Компьютерное моделирование квантовой релаксации наносистем». Данный специальный курс является основным в подготовке магистров по инновационной образовательной программе «Наноинжиниринг функциональных и биомиметических материалов».

В пособии рассмотрены детали современных методов компьютерного моделирования самосборки и самоорганизации наноэлектромеханических систем (НЭМС) ботов — активных элементов функциональных и биомиметических наноматериалов. В 13 лабораторных работах разобраны конкретные примеры наноботов графена, углеродных аккумуляторов водорода, переходных и благородных металлов и т. п.

Книга предназначена для магистрантов, аспирантов и специалистов в области нанофизики, нанохимии и нанобиодизайна новых функциональных, биомиметических материалов. Разделы пособия могут быть использованы в учебных программах «Компьютерная нанотехнология», «Наноинжиниринг функциональных и биомиметических материалов».

УДК 541.1 (075.8)

ББК 24.5я73

*Настоящее издание опубликовано в рамках реализации
Программы стратегического развития
Алтайского государственного университета*

ISBN 978-5-7904-1497-8

© Безносюк С. А., Жуковский М. С.,
Важенин С. В., Маслова О. А., 2013
© Оформление. Издательство
Алтайского государственного
университета, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
Лабораторная работа 1	
Дизайн и проектирование самосборки и самоорганизации	
неравновесных наносистем с помощью модуля «НаноТрансформеры» ...	7
1.1. Обоснование и проблематика	7
1.2. Порядок выполнения работы	8
Вопросы для контроля.....	21
Библиографический список	22
Лабораторная работа 2	
Исследование фемтосекундной корпоративной динамики нерав-	
новесных наносистем с помощью модуля «НаноТрансформеры»	23
2.1. Обоснование и проблематика	23
2.2. Порядок выполнения работы	24
Вопросы для контроля.....	34
Библиографический список	34
Лабораторная работа 3	
Исследование фемтосекундной корпоративной динамики нерав-	
новесных наносистем с помощью модуля «НаноТрансформеры»	36
3.1. Обоснование и проблематика	36
3.2. Порядок выполнения работы	37
Вопросы для контроля.....	44
Библиографический список	45
Лабораторная работа 4	
Исследование формирования и самоорганизации фрактальных	
наночастиц серебра с помощью модуля «Нанофракталы»	46
4.1. Обоснование и проблематика	46
4.2. Порядок выполнения работы	46
Вопросы для контроля.....	52
Библиографический список	53
Лабораторная работа 5	
Самосборка и самоорганизация неравновесных гелей	
наночастиц с помощью модуля «Нанофракталы»	54

5.1. Подготовка компьютерного эксперимента по самосборке и самоорганизации неравновесных гелей наночастиц с использованием модуля «Нанофракталы» (НФ) комплекса «Компьютерные нанотехнологии»	54
5.2. Выполнение компьютерного эксперимента по самосборке и самоорганизации неравновесных гелей наночастиц.....	57
Вопросы для контроля.....	58

Лабораторная работа 6

Дизайн и проектирование самосборки и самоорганизации нанокластеров с помощью модуля «Нанофракталы»	59
6.1. Подготовка компьютерного эксперимента по дизайну и проектированию самосборки и самоорганизации кластеров и их наносистем с использованием модуля «Нанофракталы» (НТФ).....	59
6.2. Выполнение компьютерного эксперимента по дизайну и проектированию самосборки и самоорганизации нанокластеров переходных металлов группы железа и углерода. .	64
Вопросы для контроля.....	66

Лабораторная работа 7

Проведение компьютерного эксперимента по дизайну и проектированию самосборки и самоорганизации нанокластеров с использованием программного модуля «Nano Monte-Carlo» комплекса.....	67
7.1. Обоснование и проблематика.....	67
7.2. Порядок выполнения работы	68
Вопросы для контроля.....	78
Библиографический список	79

Лабораторная работа 8

Расчет температуры плавления наночастиц с помощью программного модуля «Fusion».....	80
8.1. Обоснование и проблематика.....	80
8.2. Порядок выполнения работы	81
Вопросы для контроля.....	83
Библиографический список	84

Лабораторная работа 9**Исследование самоорганизации нанотубулярных**

аккумуляторов водорода	85
9.1. Обоснование и проблематика.....	85
9.2. Порядок выполнения работы	85
Вопросы для контроля.....	96
Библиографический список	96

Лабораторная работа 10**Компьютерное моделирование устойчивости интерфейсов**

на основе нанопленок нитрида галлия	97
10.1. Обоснование и проблематика	97
10.2. Порядок выполнения работы.....	98
Вопросы для контроля.....	99
Библиографический список	100

Лабораторная работа 11**Моделирование спинтронных материалов — GaAs:Mn**..... 101

11.1. Порядок выполнения работы.....	101
Вопросы для контроля.....	103

Лабораторная работа 12**Расчет энергии адгезии в нанословом катализаторе между нанослоями**..... 104

12.1. Обоснование и проблематика	104
12.2. Порядок выполнения работы.....	104
Библиографический список	106

Лабораторная работа 13**Расчет энергии адгезии в нанословом катализаторе между нанослоями**..... 107

13.1. Порядок выполнения работы.....	107
Вопросы для контроля.....	113

Заключение	114
------------------	-----

Учебное издание

Сергей Александрович Безносюк,
Марк Сергеевич Жуковский,
Станислав Валерьевич Важенин,
Ольга Андреевна Маслова

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВОЙ
РЕЛАКСАЦИИ НАНОСИСТЕМ**

Учебное пособие

Редактор *Е. М. Федяева*
Подготовка оригинал-макета,
оформление обложки — *О. В. Майер*

Издательская лицензия ЛР 020261 от 14.01.1997 г.

Подписано в печать 10.12.2013.

Формат 60x84/16. Бумага офсетная. Печать трафаретная.

Усл.-печ. л. 6,74. Тираж 300. Заказ 405.

Типография Алтайского государственного университета:
656049, Барнаул, ул. Димитрова, 66