

Министерство образования и науки РФ
Алтайский государственный университет

С. А. Безносюк, М. С. Жуковский

**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ
НАНОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ
СИСТЕМ НАНОРОБОТОВ
В МАТЕРИАЛАХ**

Монография



Барнаул

Издательство
Алтайского государственного
университета
2013

УДК 544.7
ББК 24.5+24.6
Б 399

Рецензенты:

доктор физ.-мат. наук, профессор АлтГТУ им. И.И. Ползунова
М. А. Баранов;
доктор физ.-мат. наук, профессор АлтГУ *В. А. Плотников*

Безносюк, С. А.

Б 399 **Теоретические основы создания наноэлектромеханических систем нанороботов в материалах** [Текст] : монография / С. А. Безносюк, М. С. Жуковский. — Барнаул : Изд-во Алт. ун-та, 2013. — 156 с.

ISBN 978-5-7904-1389-6

Изложены некоторые вопросы теории и компьютерных методов моделирования квантово-электродинамических механизмов движения наноэлектромеханических систем (НЭМС) наномашин в материалах. Создание новых кибернетических наноустройств и машин является наиболее приоритетной целью инжиниринга следующего поколения нанотехнологий. Книга представляет собой первую попытку анализа нанодизайна материалов с помощью НЭМС наномашин и сопоставления его с подходом атомно-молекулярных систем (АМС) наномашин. В работе показано, что существует принципиальное различие в механизмах функционирования НЭМС и АМС наномашин. Сделан вывод о том, что НЭМС машины имеют явное преимущество по эффективности и мощности процессинга функциональных материалов и могут стать основными в развитии ультраскоростного нанодизайна материалов с заранее заданными свойствами.

Книга может быть полезна специалистам в области нанотехнологий, нанобиодизайна, физики и химии наносистем, компьютерного моделирования материалов, а также студентам, магистрантам и аспирантам соответствующих специальностей.

УДК 544.7
ББК 24.5+24.6

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

ISBN 978-5-7904-1389-6

© С. А. Безносюк, М. С. Жуковский, 2013
© Оформление. Издательство
Алтайского государственного
университета, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Глава 1. Теория квантовой динамики и кинетики электромеханических наноботов	8
1.1. Законы движения квантово-механических систем	8
1.2. Законы движения квантово-полевых систем	11
1.3. Квантово-полевая концепция релаксации открытых наночастиц	12
1.4. Теория квантовой релаксации НЭМС плазмOIDных наноботов....	16
1.5. Квантовая механика плазмOIDных наноботов в адиабатическом приближении	19
1.6. Квантово-кинетический процесс релаксационного движения плазмOIDного нанобота в конденсированном состоянии	21
Глава 2. Компьютерное моделирование самодвижения, самосборки и самоорганизации плазмOIDных наноботов в материалах	28
2.1. Компьютерная модель плазмOIDных наноботов в материале	28
2.2. Физическая модель движения плазмOIDных наноботов	33
2.3. Компьютерные модели транспорта наноботов	36
2.3.1. Транспорт нанобота. Метод молекулярной механики	39
2.3.2. Транспорт нанобота. Метод молекулярной динамики	41
2.4. Компьютерные модели трансформерного движения наноботов ...	43
Глава 3. Квантовые диссипативные структуры наноботов в конденсированном состоянии	46
3.1. Мультитрансформации квантовых диссипативных структур наноботов в конденсированном состоянии	46
3.2. Топологическая информация спутывания наноботов	50
3.3. Многоуровневая иерархия наномашин	54
3.4. Моделирование бинарного наноробота в представлении метода матриц плотности	56
Глава 4. Наносинтез НЭМС (e^-e^+)-плазмOIDного нанобота в конденсированном состоянии с помощью спутанных бинарных импульсов электромагнитного излучения	64
4.1. Наносинтез НЭМС (e^-e^+)-плазмOIDного нанобота в конденсированном состоянии	64
4.2. Сравнение синтеза и свойств электромеханических и механохимических наномашин	71
Глава 5. ПлазмOIDный нанобот атома водорода	75
5.1. Компьютерное моделирование нанобота атома водорода	75

5.2. Расчет энергии НЭМС нанобота атома водорода вариационным методом нелокального функционала плотности... 79	
Глава 6. Формирование НЭМС наномашин плазмодными наноботами атомов группы железа	82
6.1. Метод Монте-Карло	82
6.2. Транспортная релаксация систем НЭМС наноботов по методу Монте-Карло	85
Глава 7. Формирование НЭМС гелей плазмодных наноботов детонационного нанопорода	88
7.1. Метод клеточных автоматов	89
7.2. Самосборка наногелей кубических наноботов углерода в порах... 94	
7.3. Морфологические типы НЭМС гелей наномашин углерода..... 96	
Глава 8. Устойчивость и трансформация НЭМС наномашин	101
8.1. Устойчивость монослойных НЭМС наномашин никеля..... 102	
8.2. Устойчивость объемных НЭМС наномашин никеля	107
8.3. Устойчивость монослойных НЭМС наномашин графена..... 114	
Глава 9. Самосборка и самоорганизация фрактальных наномашин в порах материалов	119
9.1. Компьютерная модель наносинтеза фрактальных НЭМС наноботов никеля в порах	119
9.2. Синтез фрактального покрытия наноботов Ni из активного центра на поверхности и в объеме нанопоры	123
9.3. Синтез фрактального покрытия наноботов Ni из активных центров одной грани нанопоры	124
9.4. Синтез фрактального покрытия наноботов Ni из активных центров двух граней нанопоры	127
Глава 10. Самосборка и самоорганизация наномашин водорода в нанотрубке углерода.....	132
10.1. НЭМС наноботов бирадикала водорода..... 132	
10.2. Компьютерное моделирование НЭМС наноботов бирадикала водорода при самосборке и самоорганизации в нанотрубке углерода	136
10.3. Хаотическая самосборка и самоорганизация наномашин бирадикалов водорода в нанотрубке углерода	138
Заключение.....	143
Библиографический список	145

Научное издание

Сергей Александрович Безносюк,
Марк Сергеевич Жуковский

**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ
НАНОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ НАНОРОБОТОВ
В МАТЕРИАЛАХ**

Монография

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

Издательская лицензия ЛР 020261 от 14.01.1997 г.
Подписано в печать 28.08.2013.
Формат 60x84/16. Бумага офсетная. Печать трафаретная.
Усл.-печ. л. 9,07. Тираж 100. Заказ 203.

Издательство Алтайского государственного университета

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