



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ

ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):
2014610930

Дата регистрации: 20.01.2014

Номер и дата поступления заявки:
2013618398 18.09.2013

Дата публикации: 20.02.2014

Контактные реквизиты:
bsa1953@mail.ru

Авторы:

Безносюк Сергей Александрович (RU),
Важенин Станислав Валерьевич (RU),
Гришко Михаил Сергеевич (RU),
Маслова Ольга Андреевна (RU),
Жуковский Марк Сергеевич (RU)

Правообладатель:

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Алтайский
государственный университет» (RU)

Название программы для ЭВМ:
«КомпНаноДизайн»

Реферат:

Программа позволяет моделировать строение, самосборку и самоорганизацию наносистем аккумуляторов водорода (атомарного, молекулярного, бирадикального) на углеродных нанотрубках, а также фрактальных и компактных кластерных наночастиц металлов, в материалах в рамках метода Монте-Карло с учетом двух предельных типов квантовой запутанности движения атомов металлов в условиях теплового взаимодействия с термостатом, что позволяет использовать программу в учебно/научно-исследовательском дизайне конкретных наносистем. Посадка частиц адсорбата водорода осуществляется регулярном и стохастическом (по схеме баллистической модели) режимах. Выходные данные программы могут быть экспортированы в файловых форматах, допускающих возможность работы с ними в других приложениях.

Тип реализующей ЭВМ: IBM PC - совмест. ПК

Язык программирования: Object Pascal (в среде Turbo Delphi)

Вид и версия операционной системы: Windows 7

Объем программы для ЭВМ: 2 Мб