

УДК 001.891.57:539-022.532

ББК 22.37в631

3-43

Рецензенты: д-р физ.-мат. наук, проф., зав. лабораторией математического моделирования Института промышленной экологии УрО РАН *А. Н. Вараксин*;

д-р физ.-мат. наук, гл. науч. сотр. Института химии твердого тела УрО РАН *В. П. Жуков*

Научный редактор – д-р физ.-мат. наук, проф. *Б. В. Шульгин*

Звонарев, С. В.

3-43 Моделирование структуры и свойств наносистем : учебно-методическое пособие / С. В. Звонарев, В. С. Кортков, Т. В. Штанг. – Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2014. – 120 с. ISBN 978-5-7996-1203-0

В учебно-методическом пособии рассмотрены основные математические модели динамики наносистем. Представлены методы математического описания динамики взаимодействующих частиц. Описаны модели кластерных систем. Обсуждаются модели транспортно-диффузионного переноса.

Пособие предназначено для студентов вузов, аспирантов и специалистов, изучающих математическое моделирование физических процессов.

Библиогр.: 49 назв. Табл. 12. Рис. 37.

УДК 001.891.57:539-022.532

ББК 22.37в631

ISBN 978-5-7996-1203-0

© Уральский федеральный университет, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ НАНОСИСТЕМ.....	3
ЧАСТЬ 1. МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ ДИНАМИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ.....	11
1.1. Квантовомеханические расчеты «из первых принципов»	11
1.2. Полуэмпирические методы	25
1.3. Молекулярные методы.....	26
1.4. Методы Монте-Карло	36
Контрольные вопросы.....	58
ЧАСТЬ 2. МОДЕЛИ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМ.....	60
2.1. Модели атомной подвижности	61
2.2. Структурные модели кластера	69
2.3. Фрактальные кластеры.....	78
Контрольные вопросы.....	85
ЧАСТЬ 3. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТРАНСПОРТНО- ДИФФУЗИОННОГО ПЕРЕНОСА.....	86
3.1. Модель заряжения материалов	86
3.2. Модель транспорта электронов.....	92
3.3. Модель диффузии.....	99
Контрольные вопросы.....	113
СПИСОК БИБЛИОГРАФИЧЕСКИХ ССЫЛОК	114