

УДК 530

Интернет-магазин

MAHES

<http://shop.rcd.ru>

- физика
- математика
- биология
- нефтегазовые технологии

Рит М.

Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. — 160 с.

Нанотехнология — это технология работы с молекулами. Прогнозируется, что ее развитие приведет к революционным успехам в медицине, электронике, информационных технологиях, энергетике и других областях человеческой деятельности.

Данная монография является живым и образным введением в методы и задачи нанотехнологии. В ней отражены сложности, возникающие при проектировании и конструировании вычислительных наноструктур. Детально рассмотрены этапы развития этого нового направления в науке. Основное внимание уделяется методу молекулярной динамики, который применяется для анализа нового класса задач, направленных на исследование свойств атомных кластеров (которые, в свою очередь, являются основой для наноструктур). Приводятся полные сведения из области смежных фундаментальных наук (биологии, физики, химии, информатики и техники), необходимые для понимания излагаемого в работе материала.

Книга будет полезна для студентов и специалистов по компьютерному моделированию и методам молекулярной физики.

ISBN 5-93972-461-2

Copyright © 2003 by World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. All rights reserved. This article, or parts thereof, may not be reproduced in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording or any information storage and retrieval system now known or to be invented, without written permission from the Publisher.

Russian translation arranged with World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore.

© НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005

<http://rcd.ru>

<http://ics.org.ru>

Оглавление

Предисловие к русскому изданию	7
Предисловие	8
ГЛАВА 1. Введение	12
ГЛАВА 2. Межатомные потенциалы	17
2.1. Квантово-механическая трактовка многочастичной задачи . . .	17
2.2. Поверхность потенциальной энергии	19
2.3. Приближение парного потенциала	21
2.4. Преимущества и ограничения приближения парного потен- циала	23
2.5. Феноменологические потенциалы	25
2.5.1. Потенциалы Букингема	26
2.5.2. Потенциалы Морса	28
2.5.3. Потенциалы Леннард-Джонса	29
2.5.4. Потенциалы Баркера для криптона и ксенона	30
2.6. Псевдопотенциалы	32
2.6.1. Потенциал Шоммерса для алюминия	37
2.7. Многочастичные потенциалы	38
ГЛАВА 3. Молекулярная динамика	42
3.1. Модели для расчетов методом молекулярной динамики	44
3.1.1. Начальные значения	45
3.1.2. Установление изотермического равновесия	50
3.1.3. Границы	52
3.1.4. Нанорасчет и наноконструирование	54
3.2. Методы визуализации	58
3.3. Решение уравнений движения	60
3.3.1. Алгоритмы Верле	62
3.3.2. Предиктор–корректор Нордсика–Гира	64
3.3.3. Оценка алгоритмов интегрирования	67
3.3.4. Другие методы	67
3.3.5. Нормированные величины	68

3.4.	Вычисление эффективного силового поля	68
3.4.1.	Вычисление сил	69
3.4.2.	Метод списков	70
3.4.3.	Ячеечные алгоритмы	70
3.4.4.	Метод SPSM	72
3.4.5.	Обсуждение	74
3.5.	Применения	75
ГЛАВА 4.	Изучение наносистем	77
4.1.	Термостабильность	77
4.2.	Основные свойства материала	80
4.3.	Износ на нанометровом уровне	85
4.4.	Средние значения и корреляционные функции	85
4.4.1.	Теория ансамблей	87
4.4.2.	Парная корреляционная функция	89
4.4.3.	Среднеквадратичное смещение	91
4.4.4.	Автокорреляционная функция скоростей	94
4.4.5.	Обобщенная фононная плотность состояний	96
4.4.6.	Структурный фактор	98
4.4.7.	Дополнительные замечания	102
ГЛАВА 5.	Наноконструирование — исследования и выводы	103
5.1.	Функциональные наноструктуры	104
5.2.	Наномшины	108
5.3.	Нанокластеры	115
5.3.1.	Исследование структуры	117
5.3.2.	Динамика состояний кластера Al_{500}	120
5.3.3.	Влияние начальных условий	124
5.3.4.	Влияние начальной температуры	125
5.3.5.	Влияние кристаллической структуры	126
5.3.6.	Влияние внешней формы и размера кластеров	129
5.3.7.	Влияние потенциала взаимодействия (материала)	133
5.3.8.	Выводы	136
5.4.	Моделирование превращений нанокластеров	138
5.5.	Аналоговые соображения	140
5.6.	Явление бифуркации на нанометровом уровне	143
5.7.	Аналогии с биологией	144
5.8.	Заключительные соображения	145
Литература		149
Предметный указатель		157