

Издательский дом «Юр-ВАК»

ISSN 2313-223X

# COMPUTATIONAL NANOTECHNOLOGY

научный рецензируемый журнал

№ 1, 2014 г.

г. Москва

**Журнал «Computational nanotechnology»**  
 (Вычислительные нанотехнологии)

ISSN 2313-223X

Научный рецензируемый периодический журнал по физико-математическим и техническим наукам. Концепция журнала:

Журнал посвящен вопросам нанотехнологий, возникающим в различных теоретических и практических научных разработках. Рассматриваются задачи сочетания фундаментального и прикладного аспектов в разделах физики, химии, биологии и вычислительной техники. Использование математических моделей и вычислительных машин становится частью технологического процесса создания систем на молекулярном уровне. В журнале также рассматриваются многомасштабные вычислительные модели, определяющие успех моделирования наносистем.

**Главный редактор, дир. по маркетингу, канд. наук –**  
 Ястребова Елена Владимировна

**Верстка** Юрасова О.

**Дизайн обложки** Иванов О.

**Адрес редакции:**

115419, г. Москва, ул. Донская, д.15

**Адрес для корреспонденции:**

119607, г. Москва, ул. Раменки, 21-282.

**Телефон редакции:** 8-495-932-47-09, 8-916-393-18-27

**E-Mail:** leg\_journal@list.ru

**http://www.urvak.ru**

Издание зарегистрировано в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации СМИ:

ПИ №ФС77-58561 от 14.07.2014

Учредитель журнала: «Издательский дом «Юр-ВАК»

Журнал распространяется **только по подписке.**

Индекс по каталогу агентства «Роспечать»: **70854**  
 «Computational nanotechnology».

Цена договорная.

*Журнал выпускается при участии: факультета Вычислительной математики и кибернетики МГУ им. М.В. Ломоносова, Института материаловедения ХНЦ ДВО РАН.*

Подписано к печати 30.10.2014. Формат 60x84 1/8. Печать офсетная. Бумага офсетная №1. Печ. л. 16 Тираж 500 экз. (1 завод 140 экз.)

Периодичность – 4 раза в год.

**Journal "Computational Nanotechnology"**

ISSN 2313-223X

The journal reviews the most important problems dealing with theory, modeling, design and simulations of nanostructured materials and of the fascinating new developments and interdisciplinary nanodevices, quantum computing, computational chemistry, physics and biology, nanomechanics, nanomachines, nanoelectronics, nanoprocesses, nanomagnetism, nano-optics, nanomedicines, nanobiotechnology, etc. This journal provides the survey activities in the whole field presented by scientists working in different subject areas of science, engineering and medicine.

The articles are written by scientists working on master's and doctor's theses.

All articles are reviewed by the members of the editorial board and other top-level academic lawyers.

Отпечатано в типографии ТИРАЖИ.RU г. Москва,  
 тел. (495) 585-08-95

**Председатель редакционной коллегии журнала:**

**Попов Александр Михайлович** – доктор физ.-мат. наук, профессор МГУ им. М.В. Ломоносова, действительный член РАН по отделению «Прикладная математика и управление», член Американского Физического общества

**Редакционная коллегия журнала:**

**Андреев Валерий Филиппович** – доктор физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Института проблем безопасного развития атомной энергетики Российской Академии Наук

**Бестужин Александр Роальдович** – доктор технических наук, декан Санкт-Петербургского государственного университета аэрокосмического приборостроения, заведующий кафедрой Микро- и нанотехнологий аэрокосмического приборостроения

**Власов Станислав Александрович** – кандидат технических наук, ведущий научный сотрудник Института проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН, начальник отдела нанотехнологий и ИТ – заместитель академика-секретаря Отделения нанотехнологий и ИТ РАН по научно-организационной работе

**Днестровский Юрий Николаевич** – доктор физ.-мат. наук, профессор, академик РАН, ведущий научный сотрудник Национального Исследовательского центра «Курчатовский институт» (Институт ядерного синтеза), лауреат Государственной премии СССР (1981), лауреат Ломоносовской премии МГУ I-ой степени (1976), лауреат Курчатовской премии РНЦ «Курчатовский институт» (2001)

**Елизаров Георгий Сергеевич** – доктор технических наук, директор ФГУП НИИ «Квант», лауреат Ленинской премии

**Заводинский Виктор Григорьевич** – доктор физ.-мат. наук, профессор, директор Института материаловедения Хабаровского научного центра Дальневосточного отделения Российской Академии Наук

**Крук Евгений Аврамович** – доктор технических наук, профессор, лауреат премии правительства Санкт-Петербурга, Заслуженный деятель науки РФ, директор Института информационных систем и защиты информации (СПбГУАП)

**Левин Владимир Константинович** – действительный член РАН (2003), член Бюро Отделения нанотехнологий и информационных технологий РАН, доктор технических наук, профессор, зам. директора ФГУП НИИ «Квант», лауреат Ленинской премии

**Никонов Владимир Глебович** – доктор технических наук, член президиума РАН, народный художник России

**Суетин Николай Владиславович** – доктор физ.-мат. наук, профессор, директор по науке и исследованиям ИТ кластер Фонд «Сколково»

**Чубраева Лидия Игоревна** – член-корреспондент РАН, доктор технических наук, декан факультета «Интеллектуальные системы управления и нанотехнологии», зав. кафедрой «Информационные технологии в электромеханике и робототехнике» Санкт-Петербургского государственного университета аэрокосмического приборостроения (ГУАП), директор НИИ инновационных технологий в электромеханике и электроэнергетике ГУАП

**Фетисов Владимир Андреевич** – доктор технических наук, профессор, директор института аэрокосмических приборов и систем ГУАП, зав. кафедрой системного анализа и логистики ГУАП, научный консультант комитета по транспорту ассоциации Северо-Западных субъектов РФ и Законодательного собрания Санкт-Петербурга, Действительный член Международной академии информатизации, доктор Будапештского технического университета, доктор технических наук АН Венгрии

**Хакамова Наталья Павловна** – научный сотрудник, Центр лазерной технологии и материаловедения (Москва)

**Шмелев Алексей Борисович** – кандидат физ.-мат. наук, с.н.с. МГУ ВМК Исполнительный директор группы компаний РСК (Российские суперкомпьютеры)

**Chairman of an editorial board:**

**Popov Alexander M.** – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor of the Lomonosov Moscow State University, the full member of the Russian Academy of Natural Sciences on department "Applied mathematics and management", the member of the American Physical society

**Editorial board:**

**Andreyev Valery F.** – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, senior research associate of Institute of problems of safe development of nuclear power of the Russian Academy of Sciences

**Bestugin Alexander R.** – the Doctor of Science in Engineering, the dean of St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, to the Head of the department Mikro-and nanotechnologies of space instrument making

**Vlasov Stanislav A.** – Ph.D. in Technical Sciences, the leading researcher of Institute of problems of management of V. A. Trapeznikov of the Russian Academy of Sciences, the head of department of nanotechnologies and IT – the deputy academician-secretary of Office of nanotechnology and IT Russian Academy of Sciences on scientific and organizational work

**Dnestrovsky Yury N.** – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor, academician of the Russian Academy of Natural Sciences, leading researcher of the National Research center "Kurchatov Institute" (Institute of nuclear synthesis)

**Yelizarov Georgy S.** – the Doctor of Science in Engineering, the director of Federal State Unitary Enterprise Scientific Research Institute «Kvant»

**Zavodinsky Victor G.** – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, Professor, Director of Materials Science Institute Khabarovsk scientific center of Far East office of the Russian Academy of Sciences

**Kruk Evgeny A.** – the Doctor of Science in Engineering, professor, the Honored worker of science of the Russian Federation, the director of Institute of information systems and information security (St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation)

**Levin Vladimir K.** – the academician of the Russian Academy of Sciences, the Doctor of Science in Engineering, professor, the scientific adviser of Federal State Unitary Enterprise Scientific Research Institute «Kvant»

**Nikonov Vladimir G.** – the Doctor of Technical Sciences, member of the Natural Sciences Academy, People's Artist of Russia

**Suetin Nikolai V.** – the Doctor of Science in Physics and Mathematics, Professor, Director of Science and Research IT cluster Fund "Skolkovo"

**Chubrayeva Lidiya I.** – the corresponding member of the Russian Academy of Sciences, the Doctor of Science in Engineering, the chief of department "Intellectual control systems and nanotechnologies", the department chair "Information technologies in electromechanics and robotics" St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, the director of scientific research institute of innovative technologies in electromechanics and GUAP power industry

**Fetisov Vladimir A.** – the Doctor of Science in Engineering, professor, the director of St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation GUAP, the department chair of the system analysis and GUAP logistics, the scientific consultant of committee for transport of association of Northwest territorial subjects of the Russian Federation and Legislative assembly of St. Petersburg, the Full member of the International academy of informatization, the doctor of the Budapest technical university, the Doctor of Engineering of Hungarian Academy of Sciences

**Khakamova Natalia Pavlovna** – research fellow, Center of laser technology and material science (Moscow)

**Shmelyov Alexey B.** – the Ph.D in Physics and Mathematics, senior research associate, Moscow State University Executive director RSK group of companies (The Russian supercomputers)

# СОДЕРЖАНИЕ

## Computational nanotechnology

октябрь 2014

84 страницы

№1

ISSN 2313-223X

### 1. Моделирование наносистем и наноэлектроника

#### 1.1. Вычислительные нанотехнологии

Попов А. М., доктор физ.-мат. наук, профессор ..... 6

#### 1.2. На пути к моделированию больших наносистем на атомном уровне

Заводинский В. Г., доктор физ.-мат. наук, профессор,  
Горкуша О. А., канд. физ.-мат. наук ..... 11

#### 1.3. Многомасштабное квантовое моделирование процесса структурного фазового перехода и теплового пробоя в наноточке аморфного углерода

Попов А. М., доктор физ.-мат. наук, профессор, Никишин Н. Г.,  
Шумкин Г. Н., канд. физ.-мат. наук ..... 17

#### 1.4. Использование методов многокритериальной оптимизации при моделировании взаимодействия лазерного излучения с плазмой

Иновенков И. Н., доцент, канд. физ.-мат. наук ..... 26

#### 1.5. Математическое моделирование процесса магнитного перезамыкания в трехмерной магнитной конфигурации с особой точкой высокого порядка

Ечкина Е. Ю., доцент, канд. физ.-мат. наук ..... 31

### 2. Вычислительные комплексы и информационные технологии

#### 2.1. Тенденции развития суперкомпьютеров

Левин В. К., действительный член РАН, докт. техн. наук, профессор ..... 35

### 3. Квантовые нанотехнологии

#### 3.1. EXCITON STATES OF THE OPTICAL ELECTRONS OF DIELECTRIC NANOPARTICLES IN DIELECTRIC MATRIX

Kulchin Y. N., academician of RAS, Doctor of Science in Physics and Mathematics,  
Dzyuba V. P., professor, Amosov A. V. ..... 39

#### 3.2. GENERATION THE LONGITUDINAL COMPONENT OF ELECTRIC FIELD ON THE OPTICAL AXIS USING ASYMMETRIC BINARY AXICONS ILLUMINATED BY LINEARLY AND CIRCULARLY POLARIZED BEAMS

Khonina S. N., Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor ..... 43

#### 3.3. ФОРМИРОВАНИЕ ПРОДОЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ОПТИЧЕСКОЙ ОСИ ПРИ ФОКУСИРОВКЕ ПУЧКОВ С ЛИНЕЙНОЙ И КРУГОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИЕЙ АСИММЕТРИЧНЫМИ БИНАРНЫМИ АКСИКОНАМИ

Хонина С. Н., доктор физ.-мат. наук, профессор ..... 47

#### 3.4. SUBWAVELENGTH FOCUSING OF LASER LIGHT BY MICROOPTICS DEVICES

Soifer V. A. , Doctor of Science, academician of RAS,  
Kotlyar V. V., Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor,  
Khonina S. N., Doctor of Science in Physics and Mathematics, professor ..... 52

<b>3.5. СУБВОЛНОВАЯ ФОКУСИРОВКА ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ УСТРОЙСТВ МИКРООПТИКИ</b>	
Сойфер В. А., доктор техн. наук, профессор, член-корреспондент РАН,	
Котляр В. В., доктор физ.-мат. наук, профессор	
Хонина С. Н., доктор физ.-мат. наук, профессор	54
<b>3.6. СВОЙСТВА ПЛЕНОК VO<sub>2</sub>, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ИЛО В БЕСКАПЕЛЬНОМ РЕЖИМЕ</b>	
Новодворский О. А., доктор физ.-мат. наук,	
Паршина Л. С., кандидат физ.-мат. наук,	
Храмова О.Д., кандидат хим. наук, Михалевский В. А.	56
<b>3.7. ВЛИЯНИЕ ЭНЕРГИИ ФАКЕЛА НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛЕНОК SNO<sub>2</sub>:SB ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ БЕЗКАПЕЛЬНОГО МЕТОДА ИЛО</b>	
Паршина Л. С., кандидат физ.-мат. наук, Новодворский О. А., доктор физ.-мат. наук,	
Храмова О.Д., кандидат хим. наук, Петухов И. А., Лотин А. А., кандидат физ.-мат. наук,	
Михалевский В. А., Шорохова А. В.	62
<b>3.8. ТОНКИЕ ПЛЁНКИ СУЛЬФИДА КАДМИЯ ДЛЯ ФОТОВОЛЬТАИКИ</b>	
Петухов И. А., Зуев Д. А., Шорохова А. В., Паршина Л. С., кандидат физ.-мат. наук,	
Новодворский О. А., доктор физ.-мат. наук, Храмова О.Д., кандидат хим. наук,	
Лотин А. А., кандидат физ.-мат. наук, Путилин Ф. Н., доцент, кандидат хим. наук.,	
Козловский В. Ф., кандидат хим. наук, Иванов В. К., доктор хим. наук,	
Румянцева М. Н., профессор, доктор хим. наук, Гаськов А. М., доктор хим. наук.	68
<b>4. Экономика и менеджмент высокотехнологических производств</b>	
<b>4.1. О КОМПЛЕКСНОМ ПОДХОДЕ К ОЦЕНКЕ СТРУКТУРНОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ СБАЛАНСИРОВАННОЙ МАКРОЭКОНОМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ</b>	
Владимиров С. А., доктор экон. наук, профессор	74
<b>Требования к материалам, представляемым в журнал «Computational nanotechnology», порядок и условия публикации статей</b>	83