

Мухаметзянов Ф.

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР

Компьютерное моделирование играет ключевую роль в разработке наносистем. В настоящее время можно выделить три типа математического моделирования: визуальное, вычислительное и инженерное.

Существует много пакетов программ для построения моделей визуализации и обработки результатов моделирования. В работе рассмотрены программы, получившие наибольшее распространение [1].

Инженерное моделирование позволяет создавать наносистемы, которые затем можно испытывать, подвергая различным тестам. Компания NanoTitan разработала язык описания наноструктур nanoML, на основе которого создана программа NanoXplorer. С помощью программы можно создавать самые разнообразные модели: от биочипов до нанороботов. Модель наноустройств описывается отдельными наносистемами и молекулярными машинами, которые, в свою очередь, преобразовываются в набор молекул, нанотрубок и т.д. Программа NanoXplorer позволяет использовать для разработок уже созданные модели наноподшипников, двигателей, манипуляторов [2].

Вычислительное моделирование позволяет создавать наноструктуры. Для этого используется математическое моделирование методами квантовой механики, молекулярной динамики и т.д. Кроме того, вычислительное моделирование позволяет наблюдать за поведением модели объекта при воздействии температуры, электромагнитных полей, гамма-квантов и т.д. Популярной программой вычислительного моделирования является Chem 3D. В программе реализована возможность автоматического вывода графического изображения молекулы по предварительно набранной оператором химической формуле. Основными инструментами моделирования в программе являются водородные связи, групповые метки.

Визуализационные программы позволяют рассматривать наноструктуру. Данные программы преимущественно используют для изучения и получения изображений пространственных структур биологических макромалекул. Из современных визуализационных программ, наиболее простая и удобная в использовании – программа RasMol.

Литература:

1. Рыбалкина М. Нанотехнология для всех. Большое в малом / М. Рыбалкина. – М.: Nanotechnology News Network, 2005. –434 с.
2. Свидиненко Ю. Математическое моделирование в нанотехнологиях с помощью программы nanoXplorer [Электронный ресурс] / Ю. Свидиненко – Режим доступа к статье: <http://www.nanonewsnet.ru>.
3. Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки / А.В. Елецкий // Успехи физических наук. –1997. –Т. 167, №9. – С. 945-972.

Работа выполнена под руководством асс. кафедры ФТОЭ Компанейца И.В.