

Семинар «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В НАНОТЕХНОЛОГИИ»

Научные руководители :

д.ф.м.н, профессор кафедры вычислительных методов

Еленин Георгий Георгиевич



Математическое моделирование в области нанотехнологий является новой актуальной междисциплинарной областью в современной фундаментальной науке и ключем к решениям важнейших прикладных задач, определяющим экономический потенциал общества и уровень комфортности жизни человека в наступившем веке. Нанотехнологии относятся к ядру нового, шестого технологического уклада.

Мировой рынок товаров, созданных нанотехнологиями составил 254 млрд. \$ в 2009 г. В 2015 г. ожидается 1 трлн. \$ и 3 трлн. \$ в 2020 г. Доля России на рынке нанотехнологий в настоящее время составляет 0.04%.

Развитие нанотехнологий в мире во многом происходит благодаря государственной поддержке в различных формах. Лидерами по объемам финансирования являются США, Германия, Китай, Япония и Россия. Государственная поддержка Национальной нанотехнологической инициативы в США с 2001 г. по 2011 г. составила 14.2 млрд. \$. В 2010 г. Конгресс США одобрил выделение 1.8 млрд. \$. Германия в течение 20 лет поддерживает развитие нанотехнологий. В 2010 г. федеральное финансирование составило 400 млн. евро. В Китае с 2009 г. по 2011 г. выделено 4.5 млрд. юаней. В России в 2010 г. выделен 1 млрд. рублей. На период с 2012 г. по 2015 г. выделено 79 млрд. рублей.

В ближайшие 10 лет планируется занять в наноиндустрии 20 тысяч исследователей и 2 миллиона высококвалифицированных рабочих.

Подготовка молодых талантливых специалистов для работы в многообещающей междисциплинарной области является важной задачей, требующей незамедлительного решения.

РАБОТА СТУДЕНТОВ В СЕМИНАРЕ

Работая в семинаре, студенты изучают научную литературу, делают доклады, проводят свои собственные исследования, создают компьютерные программы для вычислительных экспериментов, принимают участие в научных грантах, готовят к публикации полученные результаты.

Успешной работе помогают знания, полученные на лекциях спецкурсов, читаемых руководителем спецсеминара.

Итогом первого года обучения является курсовая работа. Заканчивается обучение в семинаре представлением квалификационной или дипломной работы. В случае успешной работы выпускник может получить рекомендацию либо в аспирантуру, либо на работу.

Некоторые результаты, полученные участниками семинара, содержатся в [33-46].

ПРЕДМЕТ, ЦЕЛИ И ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ В НАНОТЕХНОЛОГИИ

Основание того, что свойственно природным телам, нужно искать в качествах корпускул и способе их взаимного расположения.

Михаил Васильевич Ломоносов (1739 г.)



Значение бесконечно малого бесконечно велико.

Луи Пастер.

Человечество скоро научится манипулировать малыми частицами и сможет синтезировать все, что угодно.

Ричард Фейнман (1959 г.)

Что такое нанотехнология?

Технологией принято называть совокупность методов изготовления, обработки, изменения состояния, свойств, формы сырья, материала или полуфабриката, осуществляемых в процессе производства продукции [1]. Владение технологиями является высшим достижением человечества, выделившим человека из животного мира.

В настоящий момент человечество стоит на пороге создания новых существенно более мощных, так называемых **нанотехнологий**. Особенность нанотехнологий заключается в том, что рассматриваемые процессы и совершаемые действия происходят в нанометровом диапазоне пространственных размеров (1 нм. = 10^{-9} м.). “Сырьем” являются отдельные атомы, молекулы, молекулярные системы, а не привычные в традиционной технологии микронные или макроскопические объемы материала, содержащие, по крайней мере, миллиарды атомов и молекул. В отличие от традиционной технологии, для нанотехнологии характерен “индивидуальный” подход, при котором внешнее управление достигает отдельных атомов и молекул, что позволяет создавать из них как “бездефектные” материалы с удивительными, принципиально новыми физико-химическими и биологическими свойствами, так и новые классы устройств с характерными нанометровыми размерами. Ожидается, что такие устройства позволят выполнять недоступные в настоящее время действия и существенно улучшат

условия жизни человека. Понятие нанотехнология еще не устоялось. Поэтому в дальнейшем будем придерживаться следующего рабочего определения [2].

Нанотехнологией называется междисциплинарная область науки, в которой изучаются закономерности физико-химических и биологических процессов в пространственных областях нанометровых размеров с целью управления отдельными атомами, молекулами, молекулярными системами при создании новых молекул, наноструктур, наноустройств и материалов со специальными физическими, химическими и биологическими свойствами.

Основные направления в нанотехнологии

В новой, бурно развивающейся области междисциплинарных исследований можно выделить ряд важнейших направлений.

- **Молекулярный дизайн.** Препарирование имеющихся молекул и синтез новых молекул в сильно неоднородных электромагнитных полях.
- **Материаловедение.** Разработка “бездефектных” высокопрочных и легких материалов и материалов с высокой электропроводимостью и теплопроводностью.
- **Приборостроение.** Создание сканирующих туннельных микроскопов, атомно-силовых микроскопов¹, магнитных силовых микроскопов, многоострийных систем для молекулярного дизайна, миниатюрных сверхчувствительных датчиков, наномоторов, нанороботов.
- **Электроника.** Конструирование нанометровой элементной базы для компьютеров следующего поколения: нанопроводов, транзисторов, элементов сверхплотной памяти, оптических и квантовых процессоров, выпрямителей, дисплеев, акустических систем.
- **Оптика.** Разработка нанолазеров. Синтез многоострийных систем с нанолазерами.
- **Гетерогенный катализ².** Разработка катализаторов с наноструктурами для классов реакций селективного гетерогенного катализа.
- **Медицина.** Проектирование и создание нанороботов для распознавания и уничтожения вирусов, для выполнения локальных хирургических операций, сохраняющих целостность кожного покрова, управляемых микроконтейнеров для высокоточной доставки доз лекарств в определенные места живого организма, микролабораторий online анализа состояния живого организма, а также наноструктур для диагностики и щадящего лечения злокачественных опухолей, изготовление биологических тканей для трансплантации.
- **Трибология.** Определение связи между наноструктурой материалов и силами трения. Использование этих знаний для изготовления перспективных пар трения.
- **Управляемые ядерные реакции.** Проектирование наноускорителей частиц, исследование нестатистических ядерных реакций.

Значительную роль в исследовании наномира на современном этапе сыграли следующие события: создание сканирующего туннельного микроскопа (G. Binnig, G. Rohrer, 1982 г.) и сканирующего атомно-силового микроскопа (G. Binnig, K. Kuatt, K. Gerber, 1986 г.) [3] (Нобелевская премия 1992 г.), а также открытие новой формы существования углерода в природе - фуллеренов (H. Kroto, J. Heath, S. O'Brien, R. Curl, R.

¹ Описание приборов и принципов их действия содержится в [4].

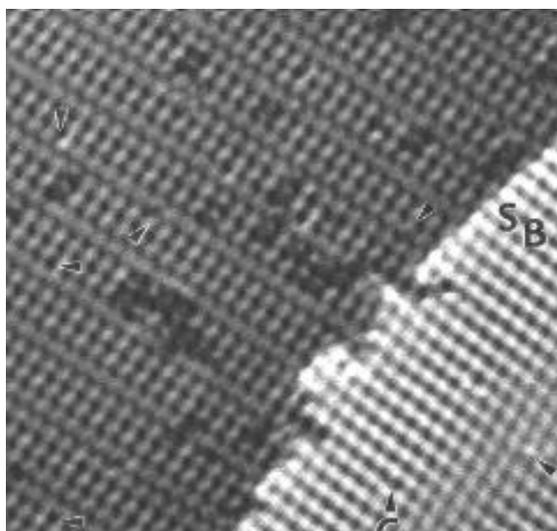
² Гетерогенный катализ - избирательное ускорение одного из возможных направлений химической реакции под действием катализатора, который вступает в промежуточное взаимодействие с участниками реакции и восстанавливается после промежуточных взаимодействий. Катализатором служит поверхность твердых тел. Катализатор не входит в состав продуктов реакции.

Smalley, 1985 г.) [4] (Нобелевская премия 1996 г.) и графена (А. К. Гейм, К. С. Новоселов, 2004 г.) [5] (Нобелевская премия, 2010 г.).

Сканирующая туннельная микроскопия

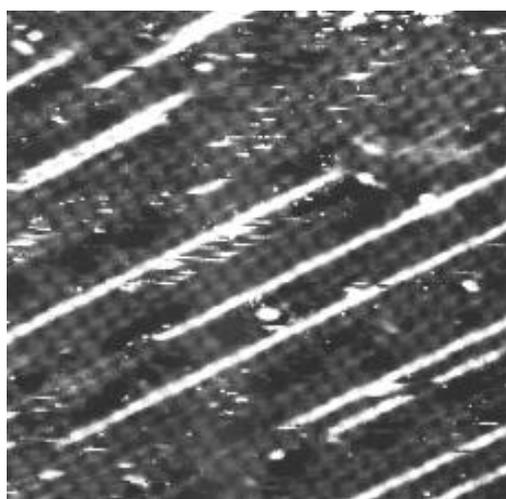
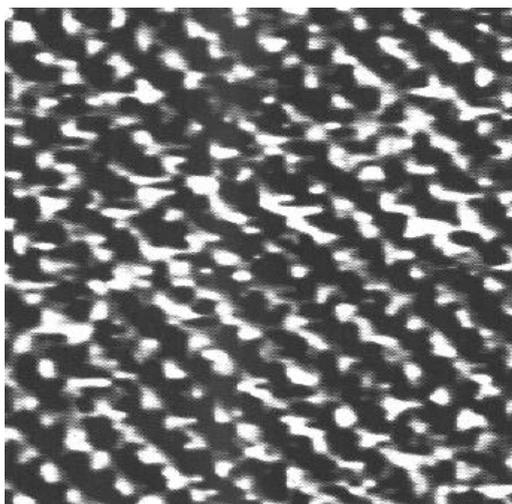
Наблюдение атомной структуры. Новые микроскопы позволили наблюдать атомно-молекулярную структуру поверхности монокристаллов в нанометровом диапазоне размеров. Наилучшее пространственное разрешение приборов составляет сотую долю нанометра по нормали к поверхности. Действие сканирующего туннельного микроскопа основано на туннелировании электронов через вакуумный барьер. Высокая разрешающая способность обусловлена тем, что туннельный ток изменяется на три порядка при изменении ширины барьера на размеры атома. Теория квантового эффекта туннелирования заложена Георгием Антоновичем Гамовым в 1928 году в работах по α -распаду [6].

С помощью различных сканирующих микроскопов в настоящее время наблюдают атомную структуру поверхностей монокристаллов металлов, полупроводников, высокотемпературных сверхпроводников, органических молекул, биологических объектов.



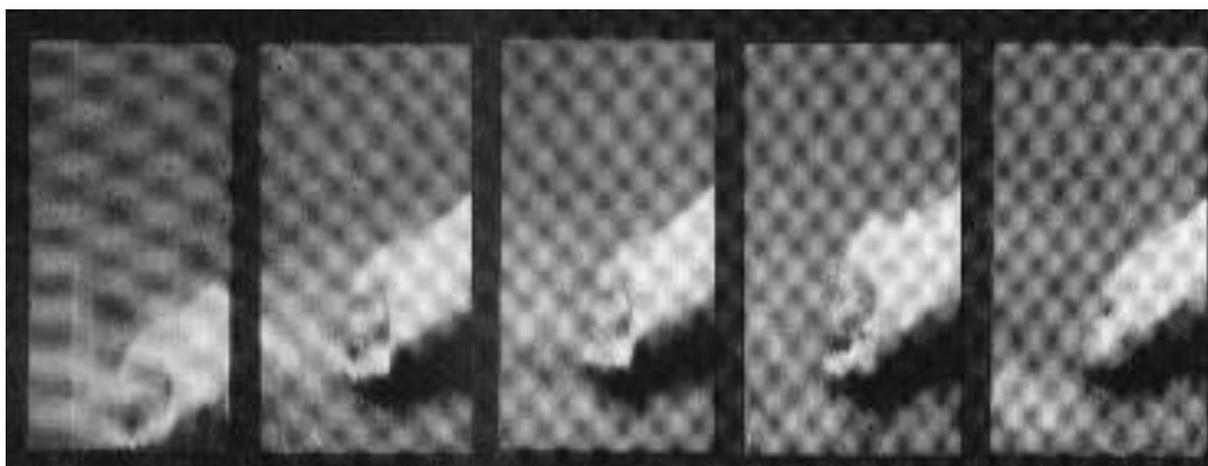
На иллюстрации показана реконструированная поверхность нижней террасы грани (100) монокристалла кремния [7]. Серые круги являются образами атомов кремния. Темные области являются локальными нанометровыми дефектами.

На следующей иллюстрации приведена атомная структура чистой поверхности грани (110) монокристалла серебра (левая рамка) и той же поверхности, покрытой атомами кислорода (правая рамка) [8].



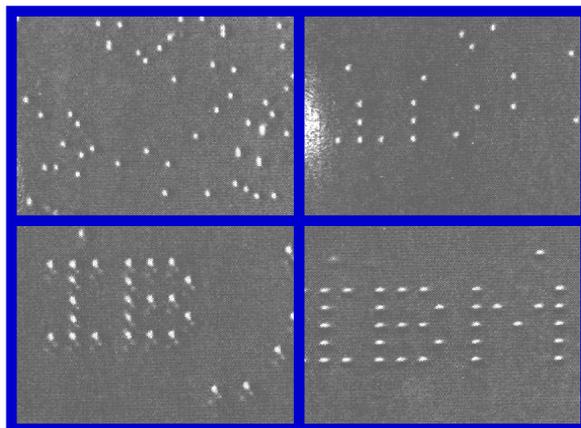
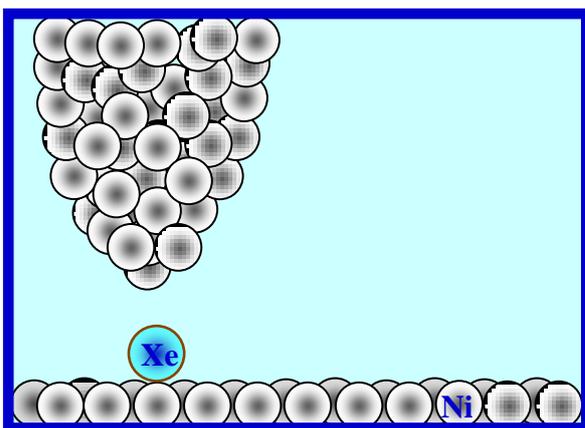
Оказалось, что кислород адсорбируется не хаотично, а образует достаточно длинные цепочки вдоль определенного кристаллографического направления. Наличие сдвоенных и одинарных цепочек свидетельствует о двух формах кислорода. Эти формы играют важную роль в селективном окислении углеводородов, например этилена.

Ниже на иллюстрации представлена последовательность кадров лабораторного фильма о проникновении вируса в живую клетку [9].



Эти иллюстрации дают представление о новых возможностях визуализации атомно-молекулярных структур средствами современного лабораторного эксперимента.

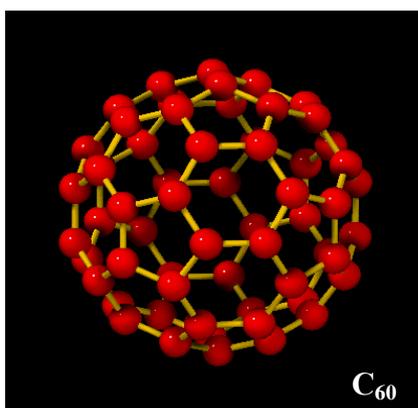
Манипуляции с атомами. Сканирующий туннельный микроскоп полезен не только при изучении атомно-молекулярной структуры вещества. Он оказался пригодным для конструирования наноструктур. С помощью определенных движений острием микроскопа удается создавать атомные структуры. Ниже представлены этапы создания надписи “IBM” из отдельных атомов ксенона на грани (110) монокристалла никеля [10]. Движения острия при создании наноструктур из отдельных атомов напоминают приемы хоккеиста при продвижении шайбы клюшкой.



Представляет интерес создание математических моделей, вычислительных алгоритмов и компьютерных программ, устанавливающих нетривиальную связь между движениями острия и перемещениями манипулируемых атомов. Математические модели и алгоритмы необходимы для разработки автоматических “сборщиков” наноконструкций.

Наноматериалы

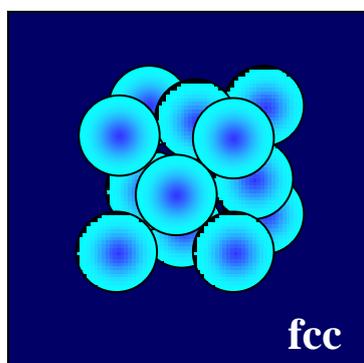
Фуллерены. Фуллерены, как новая форма существования углерода в природе, наряду с давно известными алмазом и графитом, были открыты в 1985 г. при попытках астрофизиков объяснить спектры межзвездной пыли [3, 11]. Оказалось, что атомы углерода могут образовать высокосимметричную молекулу C_{60} . Такая молекула состоит из 60 атомов углерода, расположенных на сфере с диаметром приблизительно в один нанометр и напоминает футбольный мяч³. В соответствии с теоремой Леонарда Эйлера атомы углерода образуют 12 правильных пятиугольников и 20 правильных шестиугольников. Первоначально, C_{60} получали в небольших количествах, а затем, в 1990 г., была разработана технология их крупномасштабного производства [12].



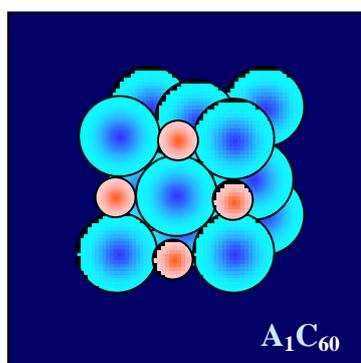
Фуллериты. Молекулы C_{60} в свою очередь могут образовать кристалл фуллерит с гранецентрированной кубической решеткой и достаточно слабыми межмолекулярными связями [13]. В этом кристалле имеются октаэдрические и тетраэдрические полости, в которых могут находиться посторонние атомы. Если октаэдрические полости заполнены ионами щелочных металлов ($\square = K$ (калий), Rb (рубидий), Cs (цезий)), то при температурах ниже комнатной структура этих веществ перестраивается и образуется новый

³ Молекула названа в честь американского архитектора, дизайнера, инженера и изобретателя Ричарда Бакминстера Фуллера (1895-1983), построившего дом из пятиугольников и шестиугольников.

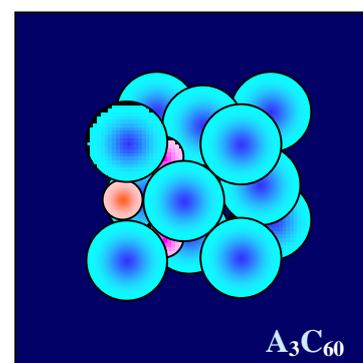
полимерный материал $\mathbb{Z}_1\text{C}_{60}$ [14]. Если заполнить также и тетраэдрические полости, то образуется сверхпроводящий материал $\mathbb{Z}_3\text{C}_{60}$ с критической температурой 20-40 К. Изучение сверхпроводящих фуллеритов проводится, в частности, в Институте им. Макса Планка в Штуттгарте [15]. Существуют фуллериты и с другими присадками, дающими материалу уникальные свойства. Например, C_{60} -этилен имеет ферромагнитные свойства [16]. Высокая активность в новой области химии привела к тому, что уже к 1997 г. насчитывалось более 9000 фуллереновых соединений.



Кристалл



Полимер

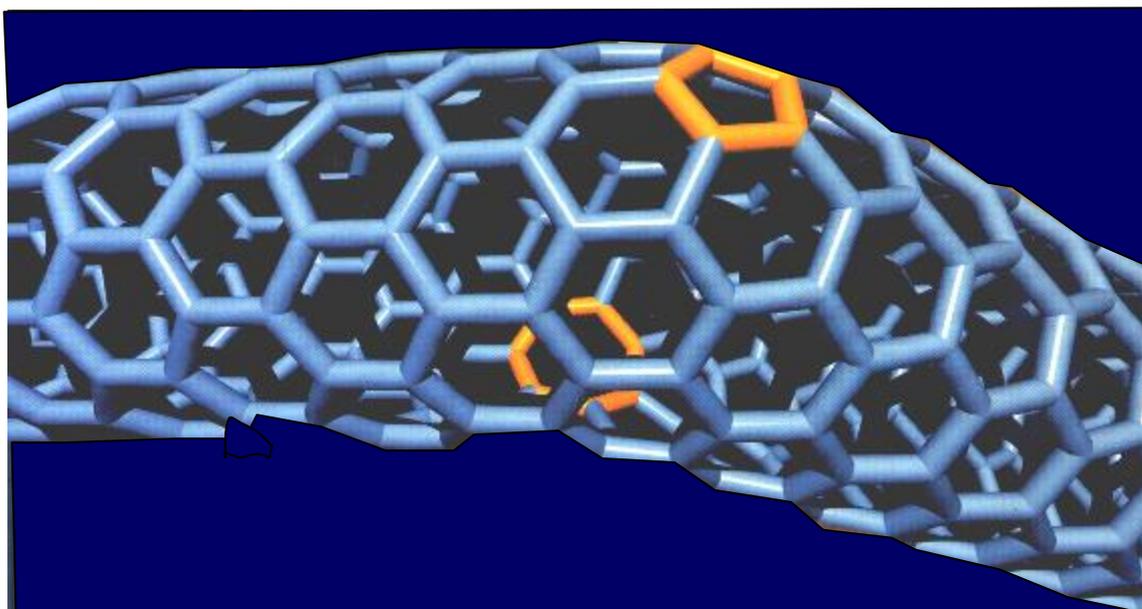


Сверхпроводник



Углеродные нанотрубки. Из углерода можно получить молекулы с гигантским числом атомов [17]. Такая молекула, например $\mathbb{Z}_{1000000}$, может представлять собой однослойную трубку с диаметром около нанометра и длиной в несколько десятков микрон. На поверхности трубки атомы углерода расположены в вершинах правильных шестиугольников. Концы трубки закрыты с помощью шести правильных пятиугольников. Следует отметить роль числа сторон правильных многоугольников в формировании двумерных поверхностей, состоящих из атомов углерода, в трехмерном пространстве. Правильные шестиугольники являются ячейкой в плоском графитовом листе, который можно свернуть в трубки различной хиральности $(m, n)^4$. Правильные пятиугольники (семиугольники) являются локальными дефектами в графитовом листе, позволяющими получить его положительную (отрицательную) кривизну. Таким образом, комбинации правильных пяти-, шести- и семиугольников позволяют получать разнообразные формы углеродных поверхностей в трехмерном пространстве.

⁴ Пара натуральных чисел (m, n) определяет вектор хиральности в плоскости графитового листа. Ось нанотрубки перпендикулярна вектору хиральности. Так, например, при (n, n) $((n, 0))$ ось трубки параллельна (перпендикулярна) стороне правильного шестиугольника.



Геометрия этих наноконструкций определяет их уникальные физические и химические свойства и, следовательно, возможность существования принципиально новых материалов. Наряду с однослойными трубками имеется возможность создавать и многослойные трубки [18]. Для производства нанотрубок используются специальные катализаторы [19, 20].

Графен. В отличие от углеродных нанотрубок, которые представляют собой скрученное графитовое полотно, графен является плоским полотном толщиной в один атом. Графен был выделен из графита в 2004 г. Андреем Константиновичем Геймом и Константином Сергеевичем Новоселовым в Манчестерском университете [5] (Нобелевская премия, 2010 г.). Графен обладает уникальными свойствами. Это самый прочный материал с рекордно высокой теплопроводностью и высокой электропроводностью. Из него сотрудниками К. С. Новоселова созданы самые маленькие транзисторы (толщиной в один атом с поперечником 10 атомов).

Нанокластеры. К множеству нанообъектов относятся сверхмалые частицы, состоящие из десятков, сотен или тысяч атомов. Свойства кластеров кардинально отличаются от свойств макроскопических объемов материалов того же состава. Из нанокластеров, как из крупных строительных блоков, можно целенаправленно конструировать новые материалы с заранее заданными свойствами и использовать их в каталитических реакциях, для разделения газовых смесей и хранения газов. Одним из примеров является $Zn_4O(BDC)_3(DMF)_8(C_6H_5Cl)^5$ [21].

Большой интерес представляют магнитные кластеры, состоящие из атомов переходных металлов, лантаноидов, актиноидов. Эти кластеры обладают собственным магнитным моментом, что позволяет управлять их свойствами с помощью внешнего магнитного поля. Примером является высокоспиновая металлоорганическая молекула $Mn_{12}O_{12}(CH_3COO)_{16}(H_2O)_4$ [22]. Эта изящная конструкция состоит из четырех ионов Mn^{4+} со спином 3/2, расположенных в вершинах тетраэдра, восьми ионов Mn^{3+} со спином 2, окружающих этот тетраэдр. Взаимодействие между ионами марганца осуществляется ионами кислорода. Антиферромагнитные взаимодействия спинов ионов Mn^{4+} и Mn^{3+} приводят к полному достаточно большому спину, равному 10. Ацетатные группы и молекулы воды отделяют кластеры Mn_{12} друг от друга в молекулярном кристалле. Взаимодействие кластеров в кристалле чрезвычайно мало. Наноманиты представляют

интерес при проектировании процессоров для квантовых компьютеров. Кроме того, при исследовании этой квантовой системы обнаружены явления бистабильности и гистерезиса [23, 24]. Если учесть, что расстояние между молекулами составляет около 10 нанометров, то плотность памяти в такой системе может быть порядка 10 гигабайт на квадратный сантиметр.

Уникальные свойства наноматериалов

Остановимся лишь на двух важных свойствах новых материалов.

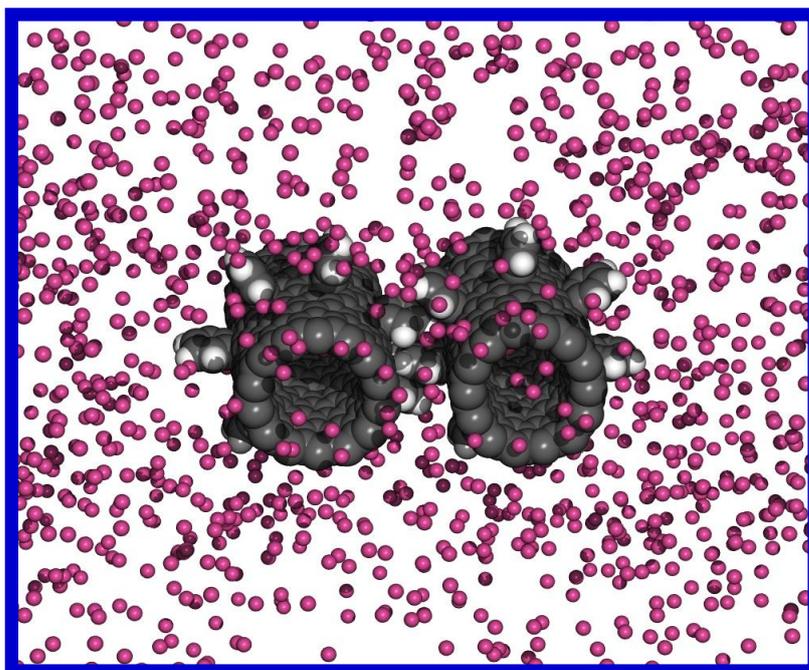
Сверхпрочность. Связи между атомами углерода в графитовом листе являются самыми прочными среди известных, поэтому графен и бездефектные углеродные трубки на два порядка прочнее стали и приблизительно в четыре раза легче ее! Одна из важнейших задач технологии в области новых углеродных материалов заключается в создании нанотрубок и графеновых «листов» «бесконечной» длины. Из сверхпрочных «нанонитей» можно «ткать» легкие материалы предельной прочности для нужд техники нового века. На основе углеродных трубок можно изготавливать новые композитные материалы. Из этих материалов, в свою очередь, можно изготавливать силовые элементы мостов и строений, несущие конструкции компактных летательных аппаратов, элементы мощных турбин, силовые блоки двигателей с предельно малым удельным потреблением топлива, бронезилеты и т. п. В настоящее время научились изготавливать трубки миллиметровой длины при диаметре порядка одного нанометра [25].

Высокая проводимость. Известно, что в кристаллическом графите проводимость вдоль плоскости слоя наиболее высокая среди известных материалов и, напротив, в направлении, перпендикулярном листу, мала. Поэтому ожидается, что электрические кабели, сделанные из нанотрубок, при комнатной температуре будут иметь электропроводность на два порядка выше, чем медные кабели. Дело за технологией, позволяющей производить трубки достаточной длины и в достаточном количестве. При разработке таких технологий и при управлении технологическим процессом не обойтись без глубоких теоретических исследований, основанных на математическом моделировании.

Наноустройства

Нанотрубки могут составлять основу новых конструкций плоских акустических систем и плоских дисплеев, то есть привычных макроскопических приборов. Из наноматериалов могут быть созданы определенные наноустройства, например, нанодвигатели, наноманипуляторы, молекулярные насосы, высокоплотная память, элементы механизмов нанороботов, контейнеры для целенаправленной доставки лекарств. Кратко остановимся на моделях некоторых наноустройств.

Нанодвигатели, нанонасосы. Модели молекулярных шестерней и молекулярных насосов предложены К. Е. Drexler и R. Merkle из IMM (Institute for Molecular Manufacturing, Palo Alto) [26, 27]. Валами шестеренок в коробке передач являются углеродные нанотрубки, а зубцами служат молекулы бензола. Характерные частоты вращения шестеренок составляют несколько десятков гигагерц. Устройства «работают» либо в глубоком вакууме, либо в инертной среде при комнатной температуре. Инертные газы используются для «охлаждения» устройства.



Высокоплотная память для компьютеров. Модель высокоплотной памяти разработана Ch. Bauschlicher и R. Merkle из NASA [28]. Схема устройства проста и состоит из зонда и алмазной поверхности. Зонд представляет собой углеродную нанотрубку (9, 0) или (5, 5), заканчивающуюся полусферой C_{60} , к которой крепится молекула C_5H_5N . Алмазная поверхность покрывается монослоем атомов водорода. Некоторые атомы водорода замещаются атомами фтора. При сканировании зонда вдоль алмазной поверхности, покрытой монослоем адсорбата, молекула C_5H_5N , согласно квантовым моделям, способна отличить адсорбированный атом фтора от адсорбированного атома водорода. Поскольку на одном квадратном сантиметре поверхности помещается около 10^{15} атомов, то плотность записи может достигать 100 терабайт на квадратный сантиметр.

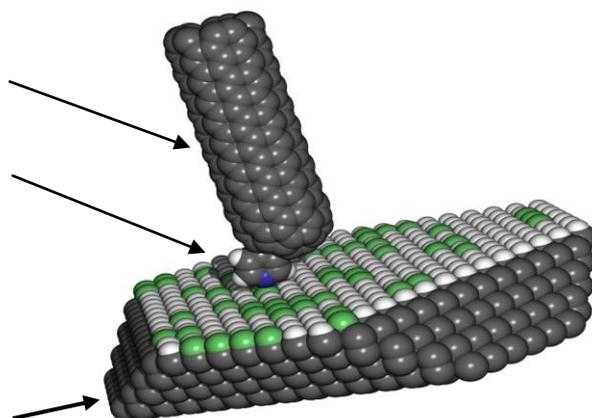
Углеродная нанотрубка

Молекула C_5H_5N на C_{60}

Атом фтора 

Атом водорода 

Алмазная подложка



Новый исторический вызов

Приведенные примеры результатов лабораторного эксперимента являются новым вызовом теории конденсированного состояния вещества и вычислительной математике. Требуется осмысление “увиденного” и “полученного”. Требуется выработка интуиции для

работы в нанометровом диапазоне размеров. В очередной раз слышна реплика Фауста Вагнеру [29]:

“Что значит понимать?

Вот, друг мой, в чем вопрос.

На этот счет у нас не все в порядке”.

Более пятидесяти лет назад атомная и термоядерная проблемы, проблемы создания новых летательных аппаратов и освоения околоземного пространства поставили фаустовский вопрос о новом уровне понимания физических и химических явлений. Работа над этими проблемами и существенная финансовая поддержка государств привела к возникновению и успешному развитию

1. вычислительной физики (магнитная гидродинамика и радиационная газодинамика, теория плазмы и управляемого термоядерного синтеза, механика полета космических аппаратов),
2. вычислительной химии (квантовая химия, молекулярная динамика, теория уравнения состояния вещества, теория химических процессов и аппаратов),
3. вычислительной математики и информатики (численные методы математической физики, дискретная математика, оптимальное управление, теория автоматов, распознавание образов, экспертные системы, автоматическое проектирование, алгоритмические языки, теория программирования).

Современные возможности лабораторного эксперимента по наблюдению и изучению явлений в нанометровой шкале пространственных размеров и заманчивые перспективы создания уникальных материалов и наноустройств породили новые теоретические междисциплинарные проблемы.

Хотелось бы понять, что на самом деле “наблюдается” при сканирующей туннельной микроскопии?

Что нового можно потенциально наблюдать и что нового можно потенциально получать в наносистемах?

Как управлять отдельными атомами и группами атомов и молекул для достижения определенных целей? Каковы границы этого управления?

Как организовать самосборку наноустройств и уникальных “бездефектных” материалов?

До какой степени макроокружение “стесняет” квантовые состояния наносистемы?

Представляют ли опасность для здоровья человека новые материалы с уникальными характеристиками?

Каковы риски человечества в связи с возможностью создания принципиально новых видов вооружений и методов ведения разведки?

Необходимость конструктивного решения этих проблем ведет к интенсивным исследованиям, формирующим новые разделы в науке. Выделим такие междисциплинарные разделы в метрологии, механике, электродинамике, оптике, теории самоорганизации. В каждом из этих разделов обозначим несколько проблем.

Метрология

1. Создание компьютерных моделей систем “прибор-нанообъект” и их калибровка.
2. Автоматизация нанометровых измерений и создание банков новых знаний.

Механика

1. Исследование механических напряжений и деформаций в наноматериалах и нанообъектах, анализ трения.
2. Моделирование движений зонда при целевом манипулировании нанообъектом.
3. Моделирование движений в наномеханизмах для наноустройств, расчет наноманипуляторов.

4. Анализ движения микроустройств в вязких средах.
5. Разработка систем управления нанороботами.

Электродинамика

1. Моделирование динамики атомов и молекул в предельно неоднородных электромагнитных полях, создаваемых многоострийными системами.
2. Расчет электрических и магнитных свойств наноматериалов.

Оптика

1. Моделирование механизмов излучения, распространения и поглощения света в нанообъектах.
2. Расчет нанолазеров и гибридных систем “зонды + нанолазеры”.

Теория самоорганизации

1. Формулировка фундаментальных принципов самосборки наноконструкций.
2. Создание компьютерных алгоритмов самосборки.
3. Разработка вычислительных алгоритмов для качественного анализа моделей самосборки.
4. Моделирование явлений пространственно-временной самоорганизации при создании наноматериалов.

Молекулярно-лучевая эпитаксия и нанолитография

1. Создание тонких металлических пленок, служащих основой высококачественных магнитных материалов.
2. Конструирование базовых элементов нанoeлектроники.
3. Создание катализаторов для селективного катализа.

Несмотря на грандиозные успехи лабораторного эксперимента, его средств недостаточно для

- объяснения наблюдаемых нано- и мезоявлений,
- определения условий существования определенных пространственно-временных структур,
- эффективного управления процессами при создании наноматериалов.

Роль математического моделирования в исследовании наномира

При конструктивном исследовании перечисленных проблем не обойтись без системы математических моделей. Вспомним одно высказывание выдающегося английского физика XIX века Вильяма Томсона⁶: “Мне кажется, что настоящий смысл вопроса - понимаете ли вы такое-то физическое положение? - будет такой: можете ли вы сделать соответствующую механическую модель? Я никогда не чувствую себя удовлетворенным, если не могу представить себе модель явления; если я могу представить себе такую модель - значит, понимаю вопрос; если не могу - значит, я не понимаю его”. Живи лорд Кельвин в наше время, он, скорее всего, использовал бы в своем высказывании термин “компьютерная модель”.

При исследовании явлений в нанометровой шкале пространственных размеров вслед за В. Томсоном, по-видимому, следует руководствоваться следующим тезисом. *Если, вы можете предложить математическую модель, вычислительный алгоритм, компьютерную программу, позволяющие воспроизвести с достаточной точностью наблюдаемое в эксперименте явление в достаточно широком диапазоне внешних параметров, то вы понимаете это явление.*

⁶ Лорд Кельвин (1824-1907) — известный британский физик, президент Лондонского физического общества, создатель теории распространения электрических импульсов по кабелю, позволившей успешно решить практическую проблему трансатлантической телеграфии.

Сформулированный принцип призывает извлекать фундаментальные знания о системе и находить пути эффективного управления для достижения принципиально реализуемых целей.

Важнейшим инструментом приобретения новых знаний наряду с лабораторным экспериментом является вычислительный эксперимент [30] на высокопроизводительных компьютерах. Для проведения вычислительных экспериментов необходимы математические модели, вычислительные методы решения математических задач, комплексы проблемно-ориентированных программ для высокопроизводительных вычислительных систем.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В НАНОТЕХНОЛОГИИ

Вычислительные эксперименты по исследованию атомно-молекулярного движения проводятся на основе иерархической системы математических моделей. Атомные ядра моделируются множеством взаимодействующих материальных точек $\mathcal{Q} = \{\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2, \dots, \mathcal{Q}_N\}$. Множество может содержать миллионы точек. Расстояния между ними могут составлять доли нанометра. Взаимодействие складывается из взаимного межъядерного отталкивания и притяжения ядер к электронной подсистеме. Притяжение и отталкивание описывается фундаментальным законом Кулона. В приближении Борна-Оппенгеймера и при условии малости длины тепловой волны де Бройля по сравнению с характерными размерами системы взаимодействие ядер с электронной подсистемой и между собой описывается с помощью функции потенциальной энергии, зависящей от положений всех материальных точек рассматриваемого множества $U = U(\mathbf{R})^7$. Для определения потенциальной энергии из первых принципов необходимо решить задачу на собственные значения для многомерного уравнения Шредингера, описывающего состояние электронной подсистемы. Эта задача является наиболее трудоемкой. Само существование молекул, состоящих из атомов является квантовым эффектом: некоторые электроны могут принадлежать двум атомам. В моделях классической молекулярной динамики потенциальная энергия считается заданной функцией координат ядер $U = U(\mathbf{R})$.

Аппроксимации потенциальной энергии. Функция $U = U(\mathbf{R})$ может аппроксимироваться различными способами для различных классов атомно-молекулярных систем. Примером наиболее простой аппроксимации потенциальной энергии является приближение парного взаимодействия. Примерами функций парного взаимодействия $u_{ij}(\mathcal{Q})$, $0 < \mathcal{Q}$ являются потенциалы Леннарда-Джонса $u_{LJ}(\mathcal{Q}) = u_0(2(\mathcal{Q}/\mathcal{Q}_0)^{-n} - (\mathcal{Q}/\mathcal{Q}_0)^{-m})$, $u_0 < 0$, $0 < \mathcal{Q}_0$, $m = 12$, $n = 6$, Кратцера $u_K(\mathcal{Q}) = u_0(2 - (\mathcal{Q}/\mathcal{Q}_0)^{-1})$, $u_0 < 0$, $0 < \mathcal{Q}_0$, Морсе $u_M(\mathcal{Q}) = u_0(2\exp(-\mathcal{Q}(\mathcal{Q} - \mathcal{Q}_0)) - \exp(-2\mathcal{Q}(\mathcal{Q} - \mathcal{Q}_0)))$, $u_0 < 0$, $0 < \mathcal{Q}_0$, $\mathcal{Q}_0^{-1} \ln(2) < \mathcal{Q}$, Шоммерса $u_{Sh}(\mathcal{Q})$ и др.[31]⁸. Перечисленные выше потенциалы определены на полуоси $\mathcal{Q} \in (0, +\infty)$, $u(\mathcal{Q}) \in \mathbb{R}$ при $\mathcal{Q} \in \mathbb{R}^+$ и $u(\mathcal{Q}) \in \mathbb{R}$ при $\mathcal{Q} \in \mathbb{R}^+$. Они имеют либо один локальный минимум u_0 при $\mathcal{Q} = \mathcal{Q}_0$, либо несколько локальных минимумов u_0, u_1, \dots на расстояниях $\mathcal{Q}_0, \mathcal{Q}_1, \dots$; $0 < \mathcal{Q}_0 < \mathcal{Q}_1 < \dots$, как, например, потенциал Шоммерса. Более сложную аппроксимацию потенциальной энергии множества взаимодействующих материальных точек дает учет тройного взаимодействия. В этом случае к потенциальной энергии парного взаимодействия добавляется парциальная потенциальная энергия u_{ijk} взаимодействия троек точек $\mathcal{Q}_i, \mathcal{Q}_j$ и \mathcal{Q}_k . Примерами являются потенциалы Стиллингера-Вебера, Терсофа, Бреннера. Существуют и более сложные аппроксимации потенциальной энергии.

⁷ Вектор \mathbf{R} описывает координаты всех точек множества Σ .

⁸ Характерные значения параметров ζ_0 и $|u_0|$ составляют десятые доли нанометра и 10^{-21} доли джоуля. Так, например, потенциал Леннарда-Джонса для аргона имеет следующие значения параметров: $\zeta_0 = 3.405 \cdot 10^{-10}$ м., $|u_0| = 1.6539 \cdot 10^{-21}$ Дж.

Эволюция состояния множества. Эволюция состояния множества \mathcal{D} описывается решением задачи Коши $\mathbf{Z}(t) = (\mathbf{P}^T(t), \mathbf{R}^T(t))^T$ для гамильтоновой системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} d\mathbf{P}/dt &= -(\partial H(\mathbf{P}, \mathbf{R})/\partial \mathbf{R})^T = -(\partial U(\mathbf{R})/\partial \mathbf{R})^T, \\ d\mathbf{R}/dt &= (\partial H(\mathbf{P}, \mathbf{R})/\partial \mathbf{P})^T = \mathbf{V}(\mathbf{R}) = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{P}, \\ \mathbf{P}(0) &= \mathbf{P}_0, \mathbf{R}(0) = \mathbf{R}_0, \end{aligned}$$

в которой вектор-функции $\mathbf{R}(t)$, $\mathbf{P}(t)$, $\mathbf{V}(t)$, $\mathbf{F}(t)$ определяют положения, импульсы, скорости материальных точек и силы, обусловленные их взаимодействием, гладкие скалярные функции $U(\mathbf{R})$ и $H(\mathbf{P}, \mathbf{R})$ являются потенциальной и полной энергией множества $H(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = 0.5 \mathbf{P}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{P} + U(\mathbf{R})$, а $\mathbf{M} = \text{diag}(m_1, m_1, m_1, \dots, m_N, m_N, m_N)$ служит матрицей масс множества.

Глобальные свойства решений задачи Коши для гамильтоновых систем. Любое решение задачи Коши имеет ряд глобальных свойств, отражающих глубокое геометрическое и физическое содержание [32].

1. На решении задачи сохраняются полное количество движения $\underline{\mathbf{P}} = (P_x, P_y, P_z)^T$, полный момент количества движения $\underline{\mathbf{L}} = (L_x, L_y, L_z)^T$, полная энергия H и фазовый объем V_{ph} :

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{P}}(t) &= \mathbf{E}_{3 \times 3} \underline{\mathbf{P}}(0) = \underline{\mathbf{P}}_0, \\ L_x(t) &= \mathbf{R}^T(t) \underline{\mathbf{P}}(t) = L_x(0) = L_{x,0}, \\ L_y(t) &= \mathbf{R}^T(t) \underline{\mathbf{P}}(t) = L_y(0) = L_{y,0}, \\ L_z(t) &= \mathbf{R}^T(t) \underline{\mathbf{P}}(t) = L_z(0) = L_{z,0}, \\ h(t) &= H(\mathbf{P}(t), \mathbf{R}(t)) = h(0) = h_0, \\ V_{ph}(t) &= \int_{\mathbf{D}(t)} d\mathbf{P} d\mathbf{R} = \int_{\mathbf{D}(0)} \det(\mathbf{D}) d\mathbf{P}_0 d\mathbf{R}_0 = \int_{\mathbf{D}(0)} d\mathbf{P}_0 d\mathbf{R}_0 = V_{ph,0} \end{aligned}$$

где $\mathbf{D}(t)$, $\mathbf{D}(0)$ - множества точек в фазовом пространстве таких, что $(\mathbf{P}^T(t), \mathbf{R}^T(t))^T$ образуют $\mathbf{D}(t)$ для всех $(\mathbf{P}^T_0, \mathbf{R}^T_0)^T \in \mathbf{D}(0)$, $\mathbf{D}(t) = \mathbf{D}(\mathbf{P}(t), \mathbf{R}(t))/\mathbf{D}(\mathbf{P}_0, \mathbf{R}_0)$, $\det(\mathbf{D}) \neq 0$.

2. Решение задачи осуществляет симплектическое преобразование любого начального состояния в любое текущее состояние $(\mathbf{P}^T_0, \mathbf{R}^T_0)^T \in \mathbf{D}(0) \rightarrow (\mathbf{P}^T(t), \mathbf{R}^T(t))^T \in \mathbf{D}(t)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(t)^T \mathbf{J} \mathbf{D}(t) &= \mathbf{J}, \\ \mathbf{J} &= \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{3N \times 3N} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{E}_{3N \times 3N} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$\mathbf{E}_{3N \times 3N}$ - единичная матрица соответствующих размеров.

3. Имеет место обратимость во времени для любого значения t , для которого существует решение задачи:

$$\begin{aligned} (\mathbf{P}^T_0, \mathbf{R}^T_0)^T &\in (\mathbf{P}^T(t), \mathbf{R}^T(t))^T \rightarrow (-\mathbf{P}^T(t), \mathbf{R}^T(t))^T \rightarrow (\mathbf{P}^T(2t), \mathbf{R}^T(2t))^T \\ (\mathbf{P}^T(2t), \mathbf{R}^T(2t))^T &\in (-\mathbf{P}^T(2t), \mathbf{R}^T(2t))^T \rightarrow (\mathbf{P}^T_0, \mathbf{R}^T_0)^T. \end{aligned}$$

На семинаре происходит знакомство с базисными задачами классической молекулярной динамики. Внимание уделяется также модельным задачам, имеющим точные решения в виде комбинации элементарных функций. Решения этих задач используются при тестировании новых вычислительных алгоритмов. Они позволяют находить причины погрешности в приближенном решении и пути повышения точности решений на значительных по величине интервалах времени.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Необходимость вычислительных методов. В случае общего положения решения задачи Коши не могут быть представлены в виде комбинации элементарных функций. Для получения приближенного решения необходимо привлекать вычислительные методы, которые порождают на сетке \mathcal{D}_t

$\Delta t = \{t_i: t_{i+1} = t_i + \Delta t_i, \Delta t_i > 0, i = 0, 1, \dots, M, t_0 = 0\}$
сеточные функции $Z_i = (P_i^T, R_i^T)^T$, $P_i = (p_{1,i}^T, p_{2,i}^T, \dots, p_{N,i}^T)^T$, $R_i = (r_{1,i}^T, r_{2,i}^T, \dots, r_{N,i}^T)^T$, $p_{j,i}$, $r_{j,i}$ – импульс и положение j -ой материальной точки в момент времени t_i .

Для получения надежных приближенных решений на относительно небольших отрезках времени можно применять вычислительные методы достаточного порядка аппроксимации.

В случае расчетов на значительных интервалах времени представляется важным использовать вычислительные методы, которые сохраняют максимальное число глобальных свойств точных решений исходной задачи. Следует заметить, что широко распространенные вычислительные методы достаточно высокого порядка аппроксимации не сохраняют перечисленные глобальные свойства решений исходной задачи и разрушают структуру фазового пространства при расчетах на больших интервалах времени. В работе семинара значительное внимание уделяется вопросам разработки новых численных методов, сохраняющих максимально возможное число глобальных свойств точных решений задачи Коши для гамильтоновых систем.

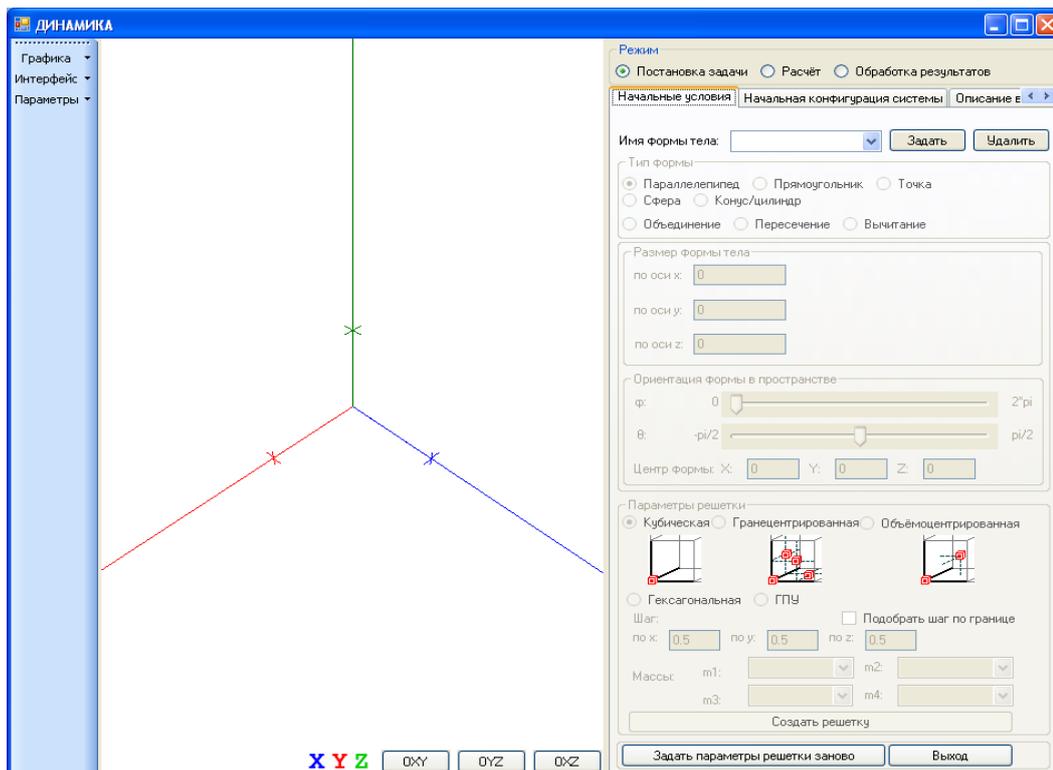
КОМПЛЕКСЫ КОМПЬЮТЕРНЫХ ПРОГРАММ

Вычислительные эксперименты по исследованию атомно-молекулярного движения выполняются с помощью комплексов компьютерных программ, реализующих эффективные вычислительные методы. Эти комплексы имеют проблемно ориентированный, дружелюбный к пользователю интерфейс, развитые средства визуализации численных решений и банк результатов вычислительных экспериментов с комментариями. На семинаре уделяется внимание дизайну интерфейса компьютерных программ.

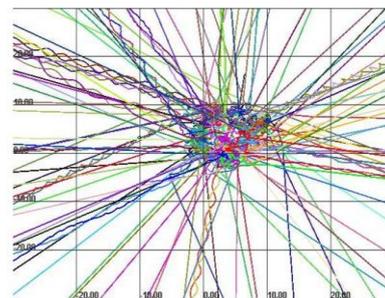
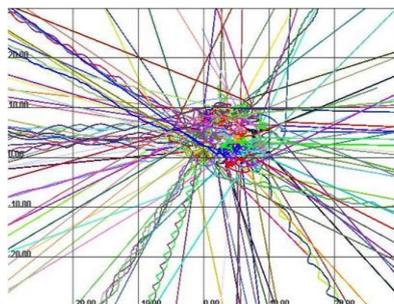
Этап создания компьютерных программ для высокопроизводительных вычислительных машин предваряется разработкой карт распределения информационных потоков по многочисленным узлам вычислений. Этому вопросу также уделяется внимание в работе семинара.

ВЫВОДЫ

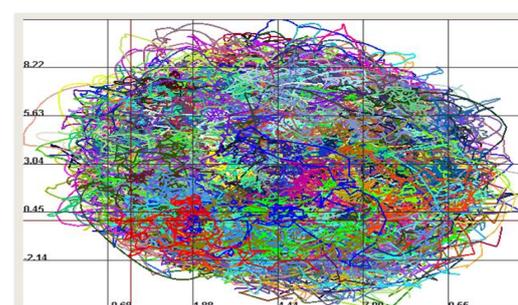
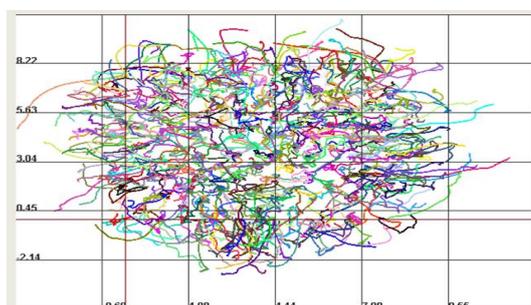
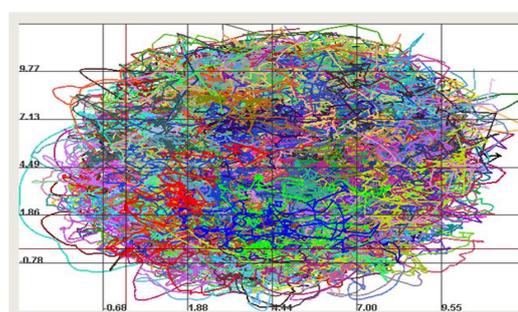
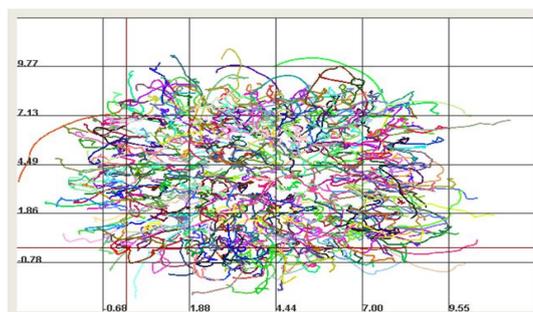
1. Математическое моделирование в области нанотехнологий является актуальным междисциплинарным направлением в современной фундаментальной науке, позволяющем решить важнейшие прикладные задачи.
2. Подготовка молодых талантливых специалистов для работы в многообещающей междисциплинарной области является важной и неотложной задачей.



Главное окно комплекса компьютерных программ ДИНАМИКА [34, 35].



Сублимация нанокуба [37]



ЛИТЕРАТУРА

1. Энциклопедический словарь, М.: Сов. Энциклопедия, 1987, 1330
2. Г. Г. Еленин. Нанотехнологии, наноматериалы, наноустройства. Информационные технологии и вычислительные системы, 2002, **2**, 32-56, а также в книге "Новое в синергетике. Взгляд в третье тысячелетие". М.: Наука, 2002, 123-159
3. G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, E. Weibel. Appl. Phys. Lett., 1982, **40**, 178; Phys. Rev. Lett., 1982, **49**, 57; 1983, **50**, 120
4. H. Kroto, J. Heath, S. O'Brien, R. Curl, R. Smalley. Nature, 1985, **318**, 162
5. A. K. Geim. Nobel Lecture. Rev. Mod. Phys., 2011, **83**, p. 851-862; K. S. Novoselov. Nobel Lecture, ibid, p. 837-849.
6. G. Gamov. Zs. F. Phys., 1928, **51**, 204; Nature, 1928, **122**, 805
7. Ph. Avouris, D. Cahil. Ultramicroscopy, 1992, **42-43**, 838
8. T. Hashizume, M. Tamiguchi, K. Motai, H. Lu et al. Ibid., 553
9. W. Haberle, J. K. H. Horber, F. Ohnesarg et al. Ibid., 1161
10. D. M. Eigler, E. K. Schweizer. Nature, 1990, 344, 524
11. J. Baggott. Perfect Symmetry. The accidental discovery of Buckminsterfullerene. Oxford University Press, Oxford, 1994
12. W. Kratschmer, L. Lamb, K. Fostiropoulos, D. Huffman. Nature, 1990, **347**, 354.
13. H.-B. Burgi, E. Blanc, D. Schwarzenbach, S. Liu, Y. Lu, M. M. Kappers, J. A. Ibers. Angew. Chem., Int. Ed. Engl., 1992, **31**, 640
14. P. W. Stephens, G. Bortel, G. Faigel, M. Tegze, A. Janossy, A. Pekker, B. Oszlanyi, L. Forro. Nature, 1994, **370**, 636-639
15. <http://www.mpi-stuttgart.mpg.de>
16. P. W. Stephens, D. Cox, J. W. Lauher, L. Mihaly, J. B. Wiley, P.-M. Allemand, A. Hirsch, K. Holczer, Q. Li, J. D. Tompson, F. Wudl. Nature, 1992, **355**, 331
17. R. E. Smalley. Presentation From Balls to Tubes to Ropes: New Materials from Carbon. American Institute of Chemical Engineers. South Texas Section. January Meeting in Huston. January 4, 1996
18. S. Iijima S. Nature, 1991, **354**, 56-58
19. S. Iijima, T. Ichihashi. Ibid., 1993, **363**, 603
20. D. Bethune, C. H. Klang, M. S. deVries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vazquez, R. Beyers. Ibid., 1993, **363**, 605
21. H. Li, M. Eddaoudi, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi. Nature, 1999, **402**, 276
22. D. Gatteschi, A. Ganeschi, L. Pardi, R. Sessoli. Science, 1994, **265**, 1054
23. A. A. Mukhin, V. D. Travkin, A. K. Zvezdin et al. Europhys. Lett., 1998, **44**, 6, 778
24. V. V. Dobrovitskii, A. K. Zvezdin. Ibid. **39**, 1
25. D. T. Colbert, J. Zhang, S. M. McClure, P. Nikolaev, Z. Chen, J. H. Hafner, D. W. Owens, P. G. Kotula, C. B. Carter, J. H. Weaver, A. G. Rinzler, R. E. Smalley. Science, 1994, **266**, 1218
26. K. E. Drexler. Molecular manufacturing: perspectives on the ultimate limits of fabrication. Phil. Trans. R. Soc. London A, 1995, **353**, 323-331
27. K. E. Drexler. Building molecular machine systems. Trends in Biotechnology, 1999, **17**, 5
28. Ch. Bauschlicher, R. Merkle. Diamond Memory. <http://nanozine.com>
29. И. В. Геме. Фауст. М.: Художественная литература, 1983, с. 26

30. А. А. Самарский. Вестник АН СССР, 1979, **5**, 38
31. М. Рунт. Наноконструирование в науке и технике. R&C Dynamics, Москва, Ижевск, 2005. 159 с.
32. E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner. Geometric Numerical Integration. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2002, 515 p.
33. Г. Г. Еленин. Предназначение комплекса компьютерных программ ДИНАМИКА. Версия 1. Макс пресс, Москва, 2009, 28 с.
34. В. А. Лукьяница, Г. Г. Еленин. Блок "Постановка задачи" комплекса компьютерных программ ДИНАМИКА. Версия 1. Макс пресс, Москва, 2009, 38 с.
35. В. А. Лукьяница. Руководство пользователю комплекса компьютерных программ ДИНАМИКА. Постановка задачи. М., МАКС Пресс, 2010, 48 с.
36. Г. Г. Еленин, П. И. Шляхов. О консервативности двухстадийных симметрично-симплектических методов Рунге-Кутты и метода Штермера-Верле. Дифференциальные уравнения, 2010, **46**, № 7, 983-989.
37. Р. Е. Власов, Г. Г. Еленин. Исследование термостабильности нанокуба. М.: МАКС Пресс, 2011, 29 с.
38. Г. Г. Еленин, П. И. Шляхов. Геометрическая структура пространства параметров трехстадийных симплектических методов Рунге-Кутты. Математическое моделирование, 2011, **23**, № 5, 16-34.
39. Г. Г. Еленин, П. А. Александров. Точные решения системы разрешающих уравнений семейства двухстадийных симметрично-симплектических методов Рунге-Кутты для задачи о движении материальной точки в поле кубического потенциала. М.: Макс Пресс, 2011, 41 с.
40. Г. Г. Еленин, П. А. Александров. Анализ точных решений одностадийного симметрично-симплектического метода Рунге-Кутты для задачи о движении в поле кубического потенциала. М.: Макс Пресс, 2011, 23 с.
41. В. А. Лукьяница. Описание структуры кода программного комплекса ДИНАМИКА. М.: МАКС Пресс, 2012, 62 с.
42. Р. Н. Бакеев, Г. Г. Еленин. Компьютерная программа для генерирования сеточных функций точного решения задачи о двумерном движении в поле ньютоновского потенциала. М.: МАКС Пресс, 2012, 18 с.
43. Г. Г. Еленин, П. А. Александров. О консервативности двухпараметрического семейства трехстадийных симметрично-симплектических методов Рунге-Кутты. Дифференциальные уравнения, 2012, **48**, № 7, 981-989
44. Г. Г. Еленин. Вычислительные методы, сохраняющие глобальные свойства решений задачи Коши для гамильтоновых систем. Международная конференция «Современные проблемы вычислительной математики и математической физики», посвященная памяти академика А. А. Самарского. Тезисы докладов, 16-17 июня 2014 г., Москва, Россия, 46-47
45. П. А. Александров, Г. Г. Еленин. О возможности построения консервативного метода решения задачи Коши для гамильтоновых систем на основе двухстадийных симметрично-симплектических методов Рунге-Кутты. Математическое моделирование, 2014, **26**, № 10,
46. Г. Г. Еленин, Т. Г. Еленина. Об одном однопараметрическом семействе разностных схем для численного решения задачи Кеплера. ЖВМиМФ, 2015, **55**, № 8, 9-14