

№ 2208

С.Ю. Юрчук

# **Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур**

Моделирование наносистем  
методами молекулярной динамики

Курс лекций

**№ 2208**

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИСиС»

Кафедра полупроводниковой электроники и физики полупроводников

С.Ю. Юрчук

# **Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур**

Моделирование наносистем  
методами молекулярной динамики

Курс лекций

Рекомендовано редакционно-издательским  
советом университета



Москва 2013

УДК 539.219.3(075.8)  
Ю83

Рецензент  
д-р физ.-мат. наук, проф. *Ф.И. Маняхин*

**Юрчук, С.Ю.**

Ю83 Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур : моделирование наносистем методами молекулярной динамики : курс лекций / С.Ю. Юрчук. – М. : Изд. Дом МИСиС, 2013. – 47 с.  
ISBN 978-5-87623-663-0

Цель курса лекций – ознакомить студентов с методами моделирования процессов выращивания наноструктур. Даны основные представления о методе Монте-Карло, основанном на выборе случайных процессов. Представлены приложения метода Монте-Карло для моделирования взаимодействия частиц. Даны основные представления моделирования выращивания нанопленок методом молекулярной динамики, с помощью которого можно численно интегрировать классические уравнения движения и проследить траекторию движения атомов и молекул в некотором конечном временном интервале, не превышающем нано- или микросекунду. Показаны примеры результатов моделирования роста нанослоев.

Предназначен для студентов, обучающихся в магистратуре по направлению 210100 «Электроника и наноэлектроника».

**УДК 539.219.3(075.8)**

## ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Моделирование наносистем методами Монте-Карло.....	4
1.1. Генерация случайных чисел на отрезке $[a, b)$ в соответствии с заданной функцией распределения $P(x)$ .....	5
1.2. Интегрирование методом Монте-Карло.....	7
1.3. Приложения метода Монте-Карло к наносистемам, состоящим из нескольких частиц .....	9
1.4. Применение метода Монте-Карло к неравновесным задачам.....	10
1.5. Уравнение Ланжевена .....	11
1.6. Взаимодействующие системы.....	14
Выводы .....	16
2. Моделирование наносистем методами молекулярной динамики....	17
2.1. Принципы молекулярно-динамического моделирования наносистем .....	17
2.2. Интегрирование уравнения движения Ньютона .....	21
2.3. МД моделирование систем в контакте с тепловой ванной-термостатом .....	25
2.4. Плазмохимическое осаждение, моделирование роста покрытий в условиях бомбардировки высокоскоростными атомами.....	30
2.5. Потенциал межчастичного взаимодействия .....	32
2.6. Алгоритм Бимона .....	35
Библиографический список .....	46