

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова  
Кафедра органической и биологической химии

# **КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ХИМИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР**

Учебно-методическое пособие

Ярославль  
ЯрГУ  
2017

УДК 544.16(075.8)  
ББК Г51с.я73  
К63

*Рекомендовано*  
*Редакционно-издательским советом университета*  
*в качестве учебного издания. План 2017 года*

Рецензент  
кафедра органической и биологической химии ЯрГУ

Составитель  
А. В. Цивов

К63 Компьютерное моделирование в химии наноразмер-  
ных структур : учебно-методическое пособие / сост.  
А. В. Цивов ; Яросл. гос. ун-т им. П. Г. Демидова. — Яро-  
славль : ЯрГУ, 2017. — 44 с.

Пособие содержит описание лабораторных работ, выполняемых при проведении компьютерного эксперимента по моделированию процессов самосборки и самоорганизации наноразмерных структур различных типов с использованием специализированного программного комплекса. Рассмотрено формирование однородных и неоднородных металлических нанокластеров, неравновесных наносистем, фрактальных нанокластеров, исследование процессов плавления наночастиц.

Предназначено для студентов, изучающих дисциплину «Основы нанохимии и аналитического контроля наноразмерных объектов».

УДК 544.16(075.8)  
ББК Г51с.я73

© ЯрГУ, 2017

# Лабораторная работа 1

## Дизайн и проектирование самосборки и самоорганизации неравновесных наносистем

**I. Цель работы.** В ходе выполнения компьютерных экспериментов планируется:

- найти характерные формы стационарных неравновесных нанокластеров с ГЦК-типом атомной упаковки в различных температурных режимах самоорганизации (на примере нанокластера  $\text{Ni}_{172}$ );

- выполнить по аналогии расчет и анализ результатов для систем с ОЦК упаковкой (на примере нанокластера  $\text{Fe}_{189}$ );

- осуществить моделирование процессов структурной реорганизации нанокластеров с полной перестройкой типа атомной «укладки» в системе (на примере ГЦК  $\rightarrow$  ГПУ превращений никеля).

### II. Порядок выполнения работы

1. Запустите программу NanoEvolver. При необходимости расположите окно программы на экране так, чтобы обеспечить себе удобство выполнения инструкций в окне NanoEvolver.

2. Обратите внимание на команду Index меню Help (см. рис. 1.1). Эта команда (а также назначенная ей «горячая» клавиша F1) открывает общее стандартное руководство по работе с программами семейства NanoEvolver.

При необходимости попытайтесь обратиться к стандартному руководству по работе с программой и найти интересующую вас информацию.

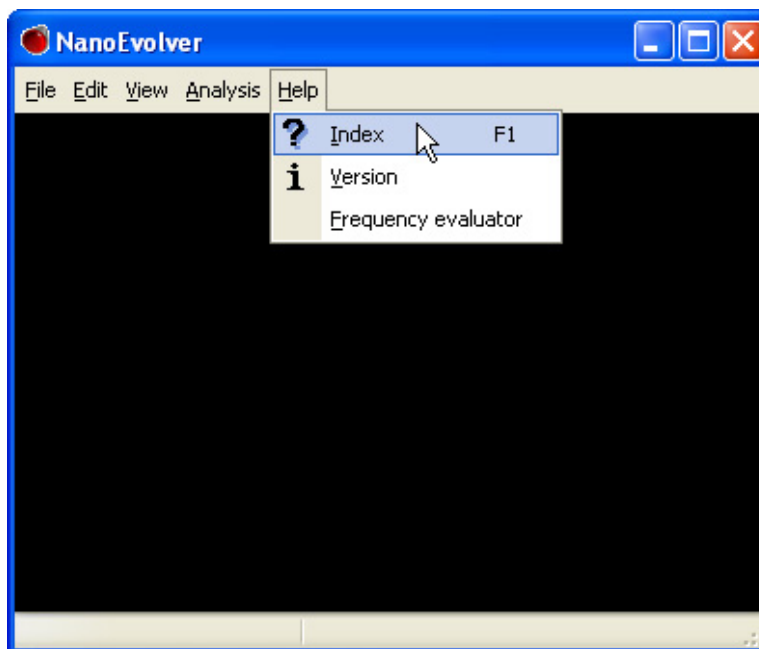


Рис. 1.1. Начальный вид главного окна программы NanoEvolver. Выделена команда Index из пункта Help главного меню

3. Загрузите из внешнего файла модель структуры кубического кластера никеля. Загрузка осуществляется посредством команды Load structure... из меню File. В диалоговом окне открытия файла найдите директорию Structures и в ней — файл Ni172\_cube.hin (см. рис. 1.2). Нажмите в диалоге кнопку «Открыть».

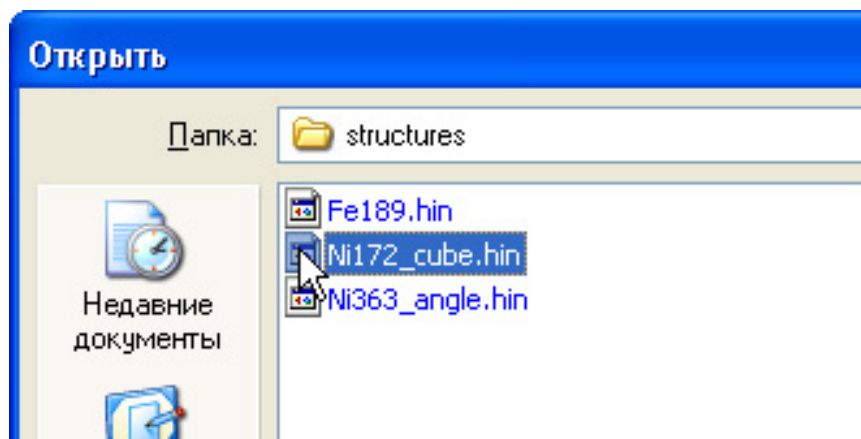


Рис. 1.2. Выбор структуры для загрузки в диалоговом окне открытия файла

**Внимание!** По умолчанию NanoEvolver использует графовое представление структур, отрисовывая только ребра графа (межатомные связи), на пересечении или концах которых находятся вершины графа — ядра атомов. Для компактности хранения на диске HIN-файлы металлических структур (типа кластеров никеля) и некоторых других содержат информацию *только о координатах ядер атомов* частицы. В связи с этим обстоятельством **после загрузки структуры кластера никеля внешний вид окна программы не изменяется**. Для всех иных случаев граф связей отрисовывается линиями в трехмерном виртуальном рабочем пространстве.

4. Вызовите команду Graph... из меню View. Задайте радиус обрезки, заведомо превышающий расстояние между наиболее удаленными атомами в структуре, например,  $1000000 a_0$ . Для этого в поле Maximum введите 1000000, затем введите 1000000 в поле Exact value и **обязательно нажмите Enter** для применения изменений (см. рис. 1.3). При этом в главном окне должен отрисовываться *полный граф* наноструктуры. Закройте окно Graph нажатием кнопки ОК.

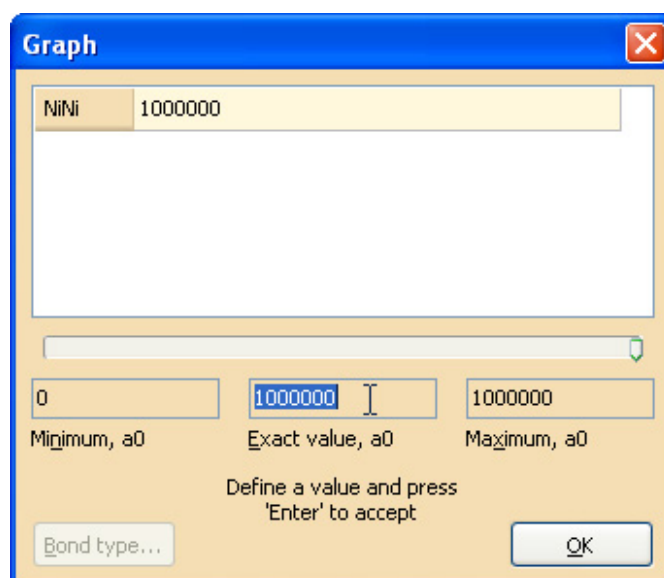


Рис. 1.3. Окно «Graph» и задание радиусов обрезки

5. Для фиксирования графа вызовите команду Lock graph из меню Edit и в ответ на запрос о подтверждении нажмите Yes.

6. Смените способ представления структуры с графового на шаровое. Для этого из меню View вызовите команду Performance... и в появившемся одноименном окне выставьте настройки, как показано на рис. 1.4. Ползунком Sphere radius задайте желаемый радиус атомов-сфер.

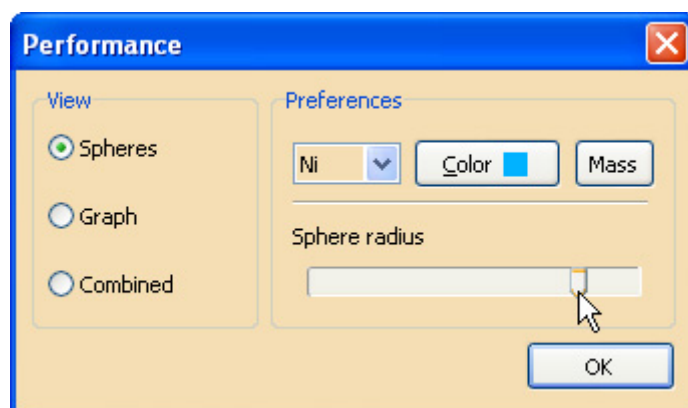


Рис. 1.4. Окно «Performance»  
и установка шарового представления модели

7. Расположите модель на экране так, чтобы обеспечить удобство ее обзора. Используйте клавиши:

- ←↑↓→ для вращения модели в пространстве
- Insert/Delete — для приближения/отдаления;
- Page Up/Page Down — для перемещения по вертикали;
- Home/End — для перемещения по горизонтали.

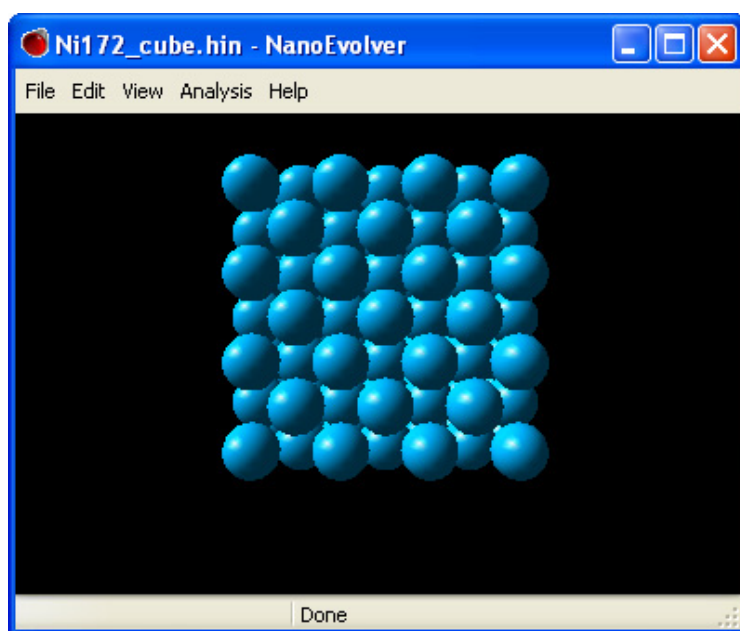


Рис. 1.5. Вид модели нанокластера никеля  $\text{Ni}_{172}$  в окне NanoEvolver

8. Указание параметров потенциалов, а также некоторых важных опций и параметров, влияющих на ход расчетной процедуры, производится в диалоговом окне Settings (см. рис. 1.6), вызвать которое можно с помощью команды Set parameters... меню Edit.

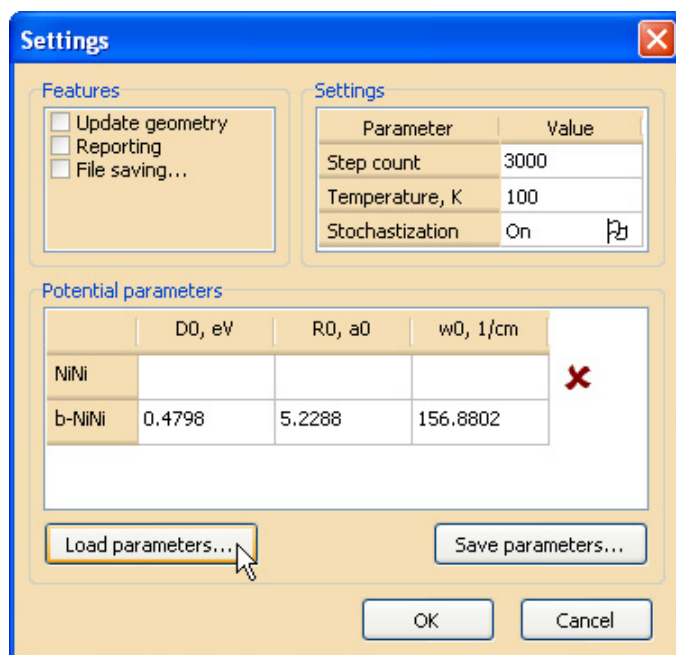


Рис. 1.6. Диалоговое окно выставления опций и параметров потенциалов

Установите параметры, как показано на рис. 1.6. Параметры межатомных потенциалов введите либо вручную, либо нажав

на кнопку Load parameters..., загрузите эти данные из внешнего файла параметров Potential\_params.txt, который расположен в той же папке, что и загруженная структура. Нажатием кнопки ОК закройте окно Settings с применением всех изменений.

9. Сохраните отчет во внешнем файле. Для этого вызовите команду Save report as... из меню File. Укажите путь и разумное имя файла (например, Ni172Init.htm), нажмите «Сохранить». NanoEvolver сохраняет отчеты в удобном формате гипертекста, можете сейчас просмотреть сохраненный на диске отчет, используя любой установленный на компьютере браузер. Анализируя отчет, обратите внимание на единицы измерения и порядок величин. Не закрывайте пока открытый отчет.

10. Вернитесь к окну NanoEvolver. Выполните оценку ближнего порядка в начальной идеальной структуре нанокластера. Начальные характеристики (например, радиус первой координационной сферы) кластера соответствуют таковым для макроскопического объемного кристалла Ni. Оценить ближний порядок позволяет парная корреляционная функция, или радиальная функция распределения  $g(R)$ . Средства расчета и построения функции  $g(R)$  доступны при вызове команды Radial distribution function... из меню Analysis (см. рис. 1.7).

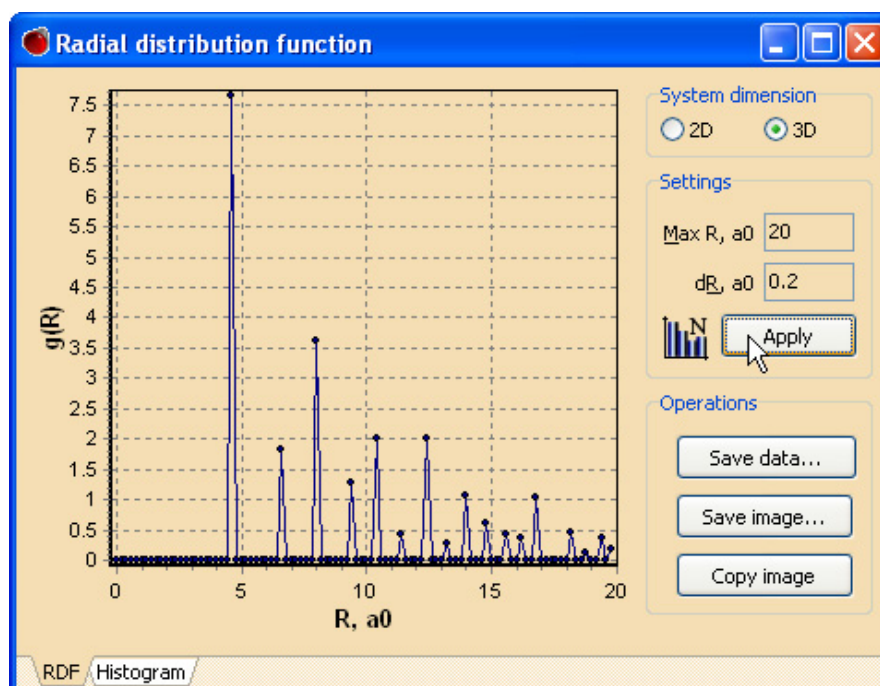


Рис. 1.7. Радиальная функция распределения «идеального» нанокластера никеля Ni<sub>172</sub>

Изначальные настройки окна Radial distribution function требуют корректировки в конкретном рассматриваемом случае. Все опции доступны для изменения на панели справа от графика.

А. Установите переключатель System dimension в положение 3D, если он находится в другом положении. Расчет функции  $g(R)$  отличен для объемных и, скажем, поверхностных структур в силу вхождения в выражение для  $g(R)$  макроскопической плотности: измеряется соответственно плотность в объеме ( $\rho$ ) или в слое ( $\sigma$ ).

Б. Установите в поле Max R желаемое расстояние, т. е. диапазон, в котором будет построен график радиальной функции распределения. От этого будет зависеть, сколько координационных сфер будет захвачено при построении.

В. Задайте в поле ввода dR шаг между точками при расчете функции. Учитывая равновесную длину связи Ni—Ni в нанокластере ( $5.23 a_0$ ), интервал в  $0.2 a_0$  является вполне достаточным, как показано на рис. 1.7.

Г. Нажмите кнопку Apply для применения измененных настроек и пересчета графика. При необходимости можете поэкспериментировать с настройками для получения максимально отчетливого представления графика. Оцените остроту пиков, сделайте вывод о степени разброса длин связей и степени регулярности идеальной начальной структуры.

Нажатием на кнопку Save image... сохраните графическое изображение для последующего сравнительного анализа. Закройте окно Radial distribution function.

11. Раскройте меню Edit главного окна программы NanoEvolver и выберите пункт Evolve. Данная команда запускает вычислительную процедуру моделирования самоорганизации исследуемой наносистемы. Результатом процедуры самоорганизации является не обязательно наинизшее по энергии состояние нанокластера, а напротив — неравновесное, но стационарное состояние, самоподдерживающееся на протяжении большей части эволюции.

По завершении первой процедуры расчетов оцените визуально изменения, произошедшие в геометрии нанокластера. Отметьте (запомните или запишите) текущие значения полной энергии связи и градиента энергии. Информацию об этих параметрах можно видеть в окошке Report (рис. 1.8).



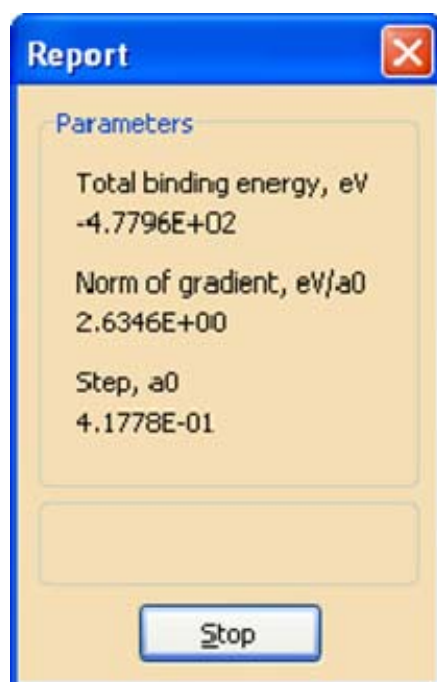


Рис. 1.8. Окно с кратким отчетом при завершении расчетной процедуры

Некоторые дополнительные данные доступны при вызове «быстрого» отчета `Edit → Total energy and total bonds` и `Edit → Calculate contributions`. В окне `Settings` установите меньшее число итераций (например, 1000) и прогоните дополнительный расчет. Сравните новое полученное значение энергии связи с предыдущим. Продолжайте до тех пор, пока динамические параметры кластера не начнут совершать мелкомасштабные флуктуации около стационарного значения (обычно трех — пяти тысяч итераций оказывается достаточно). Если в результате повторных расчетов значения энергии и градиента меняются мало, можно переходить к следующему шагу.

12. Итак, вами получен продукт низкотемпературной самоорганизации металлического нанокластера  $\text{Ni}_{172}$ . Исследуйте форму кластера. Что вы можете сказать по поводу нетипичности или, напротив, тривиальности такой формы организации кластеров? Как изменился характер упаковки атомов на поверхности наночастицы по сравнению с первоначальным неравновесным нестационарным состоянием? Сохраните отчет (`File → Save report as...`), назвав файл, например, `Ni172_100K.htm`. Исследуйте отчет и проведите сравнение с данными первоначального отчета. Могли бы вы определить по результатам своих наблюдений,

сравнительного анализа и каким-то иным формальным признакам, что происходило *в целом* с кластером по мере эволюции?

13. Постройте парную корреляционную функцию (Analysis → Radial distribution function...) для «финальной» структуры нанокластера, используя те же настройки, что и прежде. Что вы можете сказать о регулярности упаковки атомов в структуре стационарно-неравновесного аттрактора? Для сравнения можете открыть ранее сохраненное изображение графика функции для начального состояния. Если отвлечься от наноскопических размеров образца, можно ли говорить о присутствии в пределах доступных координационных сфер порядка, подобного таковому в кристалле? Или это структура «квазикристалла»?

14. Сохраните на диск результат своих расчетов — саму модель нанокластера. Для этого из меню File вызовите инструкцию Save structure.... В появившемся диалоговом окне сохранения файла укажите понятное имя, например, как и для отчета, Ni172\_100K.hin, а из выпадающего списка типа файла выберите HC files (\*.hin) [empty graph] (см. рис. 1.9).

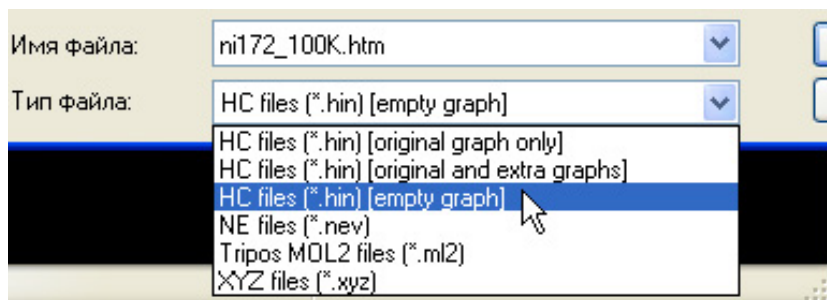


Рис. 1.9. Сохранение модели нанокластера никеля Ni<sub>172</sub> с пустым графом связей

15. Следующей задачей возьмите повторить расчет по аналогии с предыдущим, но в высокотемпературных условиях эволюции. Повторите в точности шаги 3–7 выше, после чего вызовите окно установки параметров Edit → Set parameters.... Для экономии лабораторного времени вначале быстро расплавим полностью нанокластер в жестких условиях, т. к. последовательный расчет при «умеренно высоких» температурах потребует большего времени для получения практически того же результата. Итак, в окне Settings задайте всё те же параметры, что и прежде, за исключением температуры. Конкретно — задайте установки, как показано на рис. 1.10.

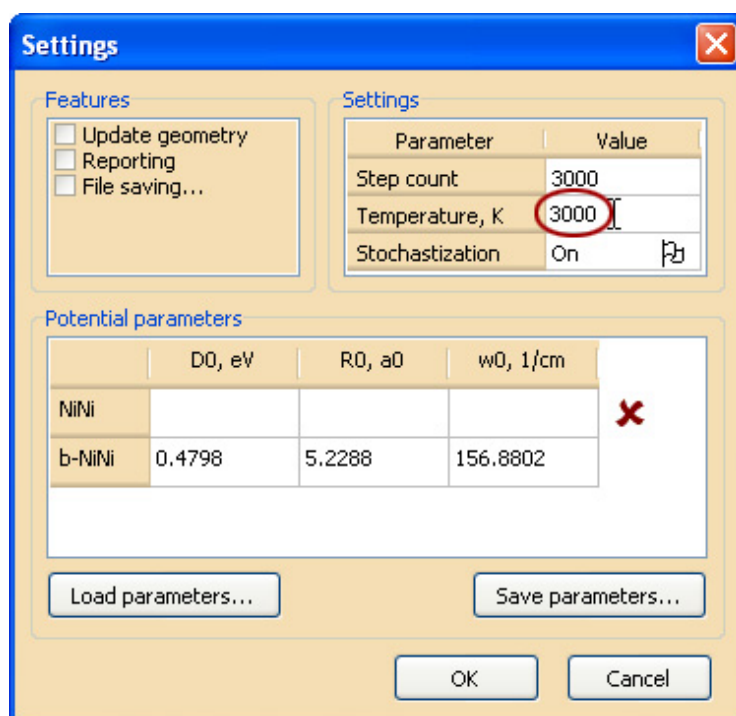


Рис. 1.10. Диалоговое окно выставления опций и параметров потенциалов. Выставлены параметры для быстрого плавления нанокластера

16. Вызовите команду Evolve. По завершении одного прогона расчетной процедуры с указанными параметрами вновь откройте окно Settings и уберите флажок напротив опции Stochastization (для этого достаточно щелкнуть по нему указателем мыши), переключив тем самым значение этой опции на Off.

Последовательно вызывайте команду Evolve из меню Edit до тех пор, пока кластер не потеряет форму и полностью не оплавится. Доведите систему до состояния, похожего на показанное на рис. 1.11.

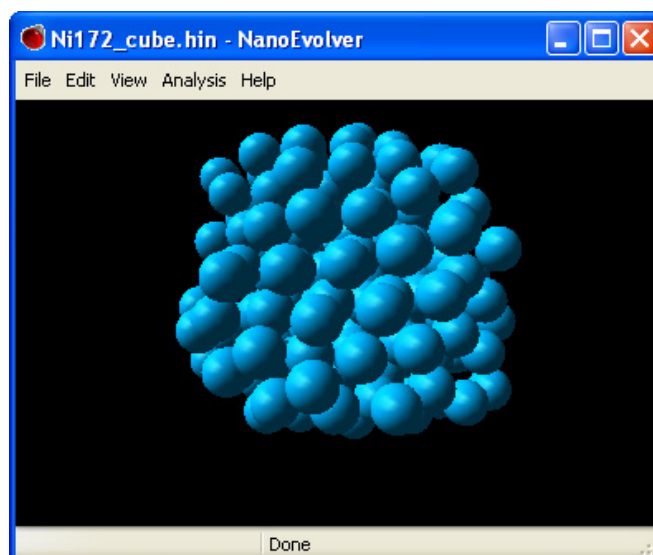


Рис. 1.11. Оплавленный в жестких условиях нанокластер  $\text{Ni}_{172}$

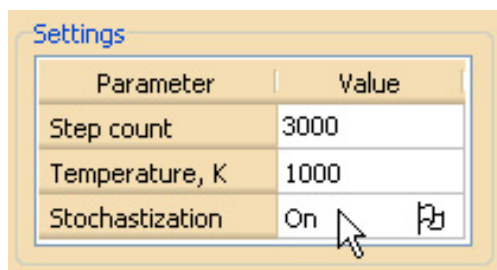


Рис. 1.12. Восстановление параметров и режима эволюции

17. После того как вам удастся расстроить атомный порядок кластера  $\text{Ni}_{172}$ , вернитесь к окну Set parameters и задайте рабочие параметры, как показано на рис. 1.12.

18. Выполните с установленными параметрами несколько циклов расчета (Edit → Evolve). Добейтесь стационарности параметров нанокластера в данном температурном режиме.

19. Продолжите расчеты, понизив рабочую температуру до 100 K, т. е. приведя условия эволюции к эквивалентным тем, что использовались при моделировании низкотемпературного процесса самоорганизации. С понижением температуры, очевидно, понизится полная энергия связи нанокластера. Добейтесь стационарности режима эволюции при этой температуре.

20. Таким образом, вами получен второй тип стационарного аттрактора фазовых траекторий в пространстве конфигураций исследуемой системы. Как вы считаете, достаточно ли оснований назвать его альтернативной топологически неэквивалентной формой существования нанокластера  $\text{Ni}_{172}$ ?

Сравните полные энергии связи в кластере для случая низкотемпературной самоорганизации и имеющегося теперь случая охлаждения после эволюции в высокотемпературном режиме. Как по-вашему, в какой степени различимы эти два топологически неэквивалентных состояния, если исходить только из данных об их динамических параметрах, таких как энергия связи?

21. Сохраните по очереди отчет (File → Save report as...) и саму структуру (File → Save structure...). Имена файлов можете придумать сами или по аналогии с предыдущими назвать их, к примеру,  $\text{Ni}_{172\_1000\text{K}.htm}$  и  $\text{Ni}_{172\_1000\text{K}.hin}$ .

22. Постройте график радиальной функции распределения (Analysis → Radial distribution function...). Насколько в вашем случае вид функции соответствует структуре метгласа (аморфного металла)?

23. Закрепите полученные навыки работы с программой, самостоятельно по аналогии проведя расчет для системы

с ОЦК-типом упаковки. Для этого из той же папки structures загрузите файл Fe189.hin. Используйте следующие параметры аппроксимирующих потенциалов Fe—Fe:  $D_0 = 0.5276$  эВ;  $R_0 = 5.4161 a_0$ ;  $\omega = 160.2397 \text{ см}^{-1}$ .

В данном случае в целях экономии времени достаточно исследовать лишь процесс самоорганизации в условиях низких температур.

24. После того как закончите работу с нанокластером железа, можете приступить к последнему по плану пункту лабораторного эксперимента — моделированию ГЦК  $\rightarrow$  ГПУ превращений никелевых квантово-размерных частиц. Загрузите из файла Ni363\_angle.hin модель нанокластера, оформленного в виде уголка  $\perp$ . Как вы заметите сразу после загрузки, данная структура, в отличие от предыдущих случаев, сохранена вместе с графом связей, который является первичным (prime) графом. Задания extra-графа для этой модели не требуется, поэтому сразу зафиксируйте граф, вызвав, как обычно, команду Lock graph из меню Edit.

25. Переключите способ отображения на шаровую модель (View  $\rightarrow$  Performance...  $\rightarrow$  Spheres) и подберите желаемый диаметр «атомов».

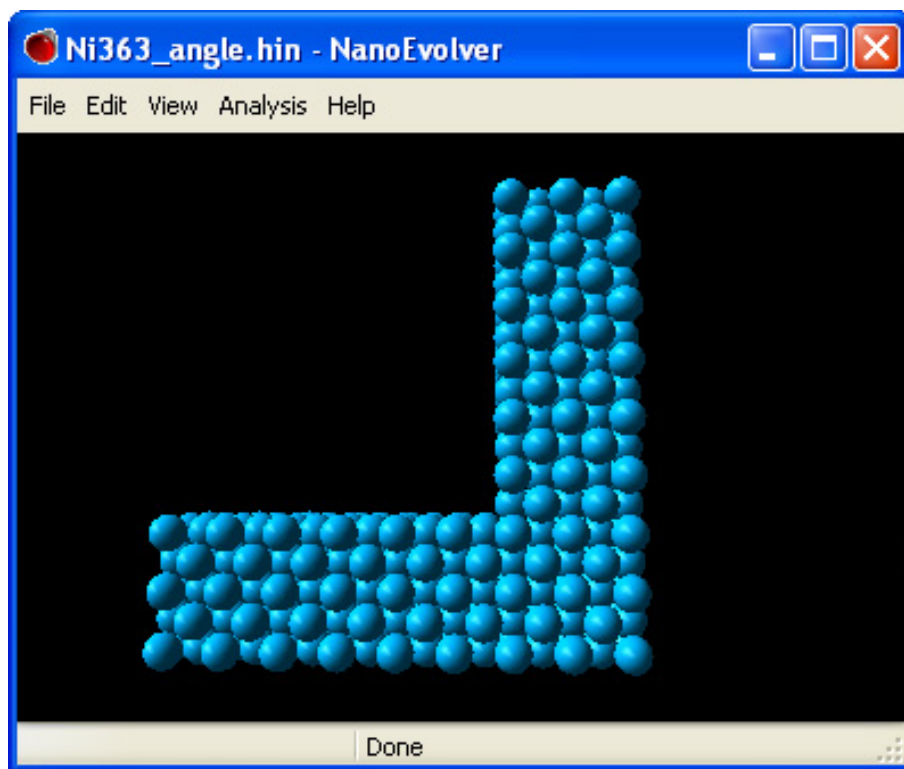


Рис. 1.13. Начальная геометрия «уголка» Ni<sub>363</sub>.  
Упаковка атомов — типа ГЦК.

26. Выставьте параметры в окне Settings по примеру на рис. 1.14.

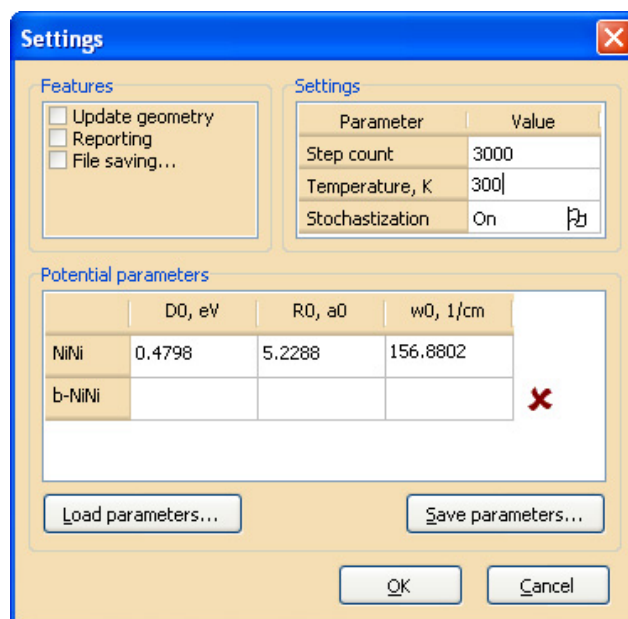


Рис. 1.14. Диалоговое окно опций и параметров потенциалов для «уголка»  $\text{Ni}_{363}$

27. Сохраните отчет на диск и откройте его в браузере. Вы сможете работать с ним, пока выполняются продолжительные компьютерные расчеты. Пока же оставьте отчет открытым и возвращайтесь к главному окну программы NanoEvolver.

28. Запустите расчетную процедуру (Edit → Evolve) и запаситесь терпением: нуклеарность системы является критическим параметром по отношению к скорости расчетов. Используйте время ожидания для анализа открытого ранее файла с отчетом.

29. По завершении первого продолжительного цикла расчетов оцените изменения, затронувшие геометрию нанокластера. Наблюдаете ли вы эффект реорганизации структуры с изменением типа атомной укладки? Откройте окно Settings, уменьшите температуру до 200 K, а количество итераций — до 1000. Проведите с этими параметрами дополнительный расчет, имеющий целью достижение лучшей локализации в окрестности стационарной точки аттрактора. После этого еще уменьшите температуру до 100 K и с помощью завершающего контрольного цикла удостоверьтесь, что кластер эволюционирует в стационарном режиме (оцените масштаб флуктуаций энергии от цикла к циклу).



30. Сохраните отчет и структуру. Проверьте, как отразился структурный переход ГЦК  $\rightarrow$  ГПУ на расположении максимумов радиальной функции распределения. По сумме всех выполненных в лабораторной работе экспериментов сделайте обобщающий вывод о способах пространственной организации стационарных неравновесных металлических наносистем и их возможных взаимных превращениях.

### **III. Контрольные вопросы к лабораторной работе 1**

1. Назовите основные, на ваш взгляд, признаки мультичастиц-трансформеров и их отличия от «обычных» наночастиц.
2. Какие фундаментальные процессы наномира «вершат» эволюцию мультичастиц, их динамику и кинематику?
3. Какие, по-вашему, предпосылки существуют для феномена самоорганизации на наноуровне?
4. В пространстве каких переменных дается наиболее последовательное описание процессов самосборки и самоорганизации неравновесных наночастиц?
5. Какие вы предъявляли бы требования к программному обеспечению, призванному моделировать свойства и поведение мультичастиц?

## **Лабораторная работа 2**

### **Дизайн и проектирование самосборки и самоорганизации нанокластеров с использованием программного модуля Nano Monte-Carlo**

**I. Цель работы.** Знакомство с методами решения задач по проектированию самосборки и самоорганизации нанокластеров. Приобретение навыков работы с программным модулем Nano Monte-Carlo.

### **II. Порядок выполнения работы**

1. Запустите программу Nano Monte-Carlo. Перед началом моделирования необходимо внести в программу стартовые параметры. Для этого открываем меню Preferences, см. рис. 2.1.

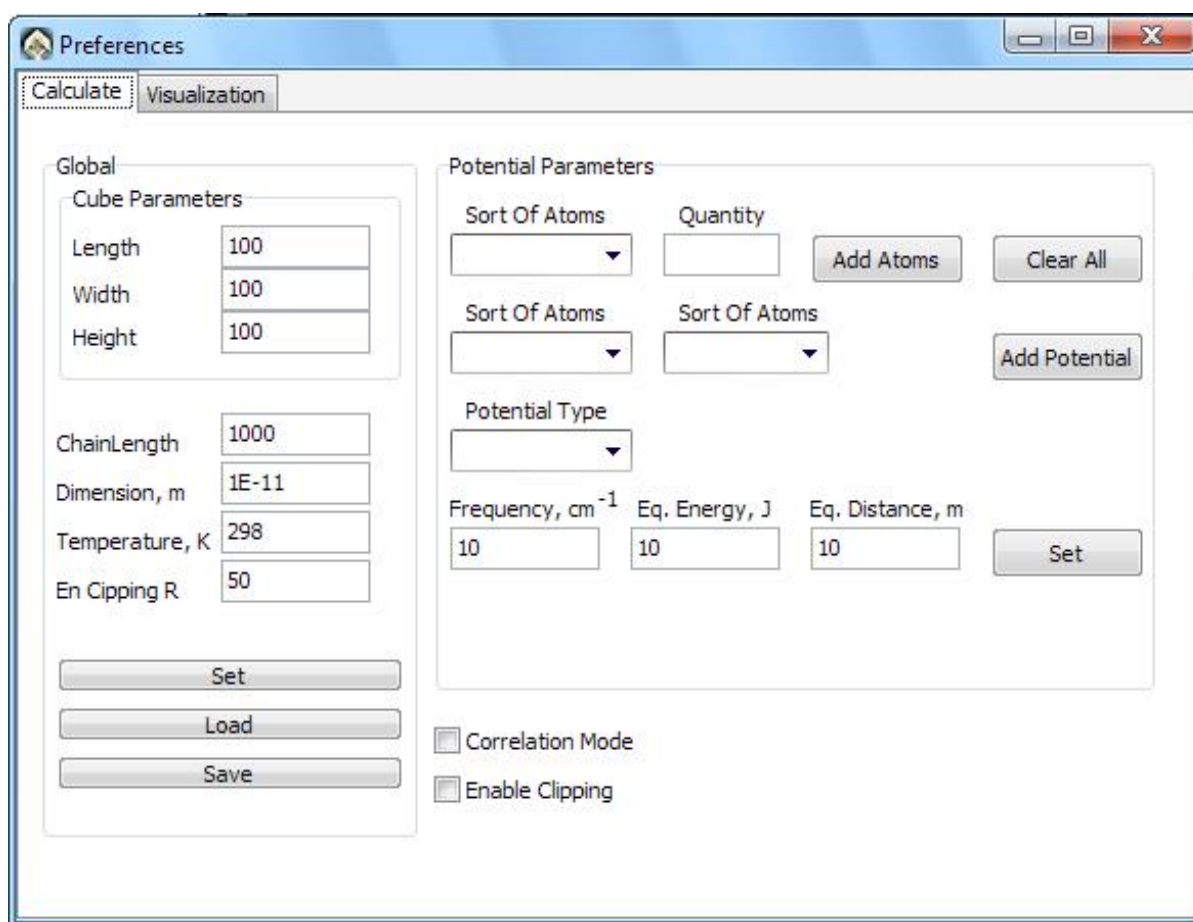


Рис. 2.1. Меню настроек стартовых параметров моделирования

2. На вкладке «Calculate» в разделе «Cube Parameters» задаются параметры, ограничивающие объем пространства моделирования:

Length — задает длину «пространства моделирования» по координате X;

Width — задает длину «пространства моделирования» по координате Y;

Height — задает высоту «пространства моделирования» по координате Z.

Заносим в эти ячейки значения «100». Ниже вносим параметры ChainLength = 30000, Dimension = 1E – 11 и Temperature = 298.

Для применения необходимых изменений необходимо нажать кнопку Set. Введенные параметры можно сохранить в файл нажатием кнопки Save и в дальнейшем загружать нажатием кнопки Load.

3. В разделе Potential Parameters задается система моделируемых атомов и потенциалы парных взаимодействий.



В поле Sort Of Atoms из списка всех элементов Периодической таблицы Д. И. Менделеева по очереди выбираются элементы Fe, Co, Ni, в поле Quantity задается их количество в системе и нажимается кнопка Add Atoms.

При этом выбранные атомы появляются в двух нижних полях Sort Of Atoms (см. рис. 2.2). В этих полях по очереди выбираются комбинации существующих в системе потенциалов парного взаимодействия и нажимается кнопка Add Potential. При этом выбор значений FeNi и NiFe соответствуют одному и тому же потенциалу.

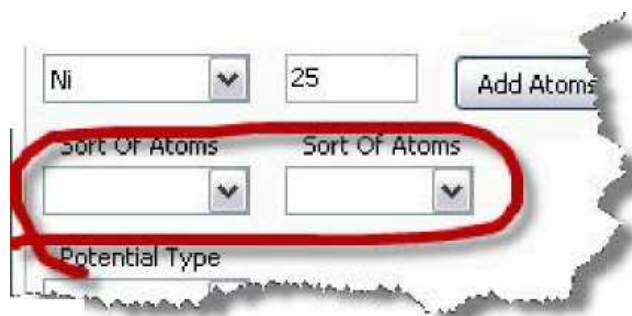


Рис. 2.2. Выбор типа атомов и добавление параметров потенциалов

В поле Potential Type выбирается потенциал парного взаимодействия и задаются его параметры:

- Frequency — частота колебаний связи ( $\text{см}^{-1}$ ) (после изменения значения для его активации в памяти программы требуется нажатие клавиши Set);

- Eq. Energy — энергия связи для равновесного расстояния между атомами (Дж) (после изменения значения для его активации в памяти программы требуется нажатие клавиши Set);

- Eq. Distance — равновесное расстояние между атомами (после изменения значения для его активации в памяти программы требуется нажатие клавиши Set).

Параметры потенциала Морзе, рассчитанные методом ООПФ для некоторых видов связей, представлены в табл. 1.

Таблица 1

### ***Параметры потенциала Морзе***

Связь	$\varepsilon_0, \text{Дж} \times 10^{19}$	$r_0, \text{нм}$	$w, \text{см}^{-1}$	Связь	$\varepsilon_0, \text{Дж} \times 10^{19}$	$r_0, \text{нм}$	$w, \text{см}^{-1}$
Fe–Fe	1,089	0,268	1933	Fe–Co	1,121	0,266	1224
Co–Co	1,154	0,257	1025	Co–Ni	1,170	0,261	973
Ni–Ni	1,186	0,264	1477	Fe–Ni	1,138	0,263	1391

4. На вкладке Visualization можно задать параметры отображения элементов (подробное описание настроек описано в файле справки).

5. После окончания конфигурирования программы создается пробная, случайная конфигурация нажатием Run/Randomize, см. рис. 2.3.

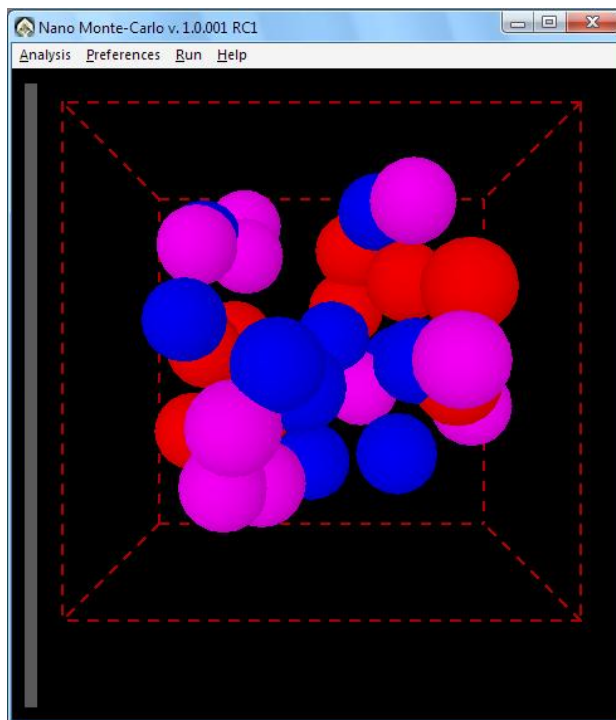


Рис. 2.3. Случайная конфигурация нанокластера из трёх типов атомов

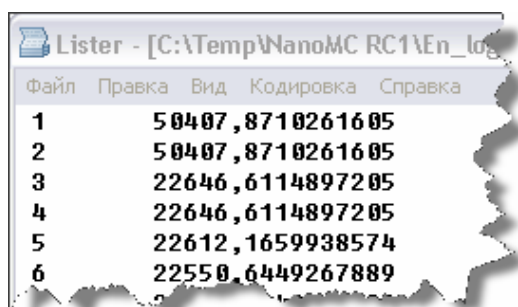
Если созданная конфигурация не соответствует требуемым параметрам, то создается следующая конфигурация повторным нажатием Run/Randomize либо переименованием файла log.txt в файл Load.txt и последующим редактированием координат атомов при помощи текстового редактора (открыть каталог программы можно выбрав из меню команду Analysis/Open; для запуска текстового редактора воспользуйтесь пунктом меню Analysis/Editor или перейдите в каталог Notepad++ каталога программы Nano Monte-Carlo и запустите notepad++.exe).

Конфигурацию, удовлетворяющую всем требованиям, необходимо сохранить в файле с именем Load.txt (если конфигурация создана нажатием Run/Randomize, то для сохранения конфигурации переименовывается файл log.txt в Load.txt).

6. Далее запускается процесс моделирования нажатием Run/Start (для выхода из расчета необходимо нажать Run/Stop).

Ход расчета сохраняется в файле log.txt. После окончания расчета лог-файл (log.txt) требуется переименовать или скопировать в другой каталог, т. к. при повторном запуске расчета он будет перезаписан.

7. После окончания расчета из лог-файла можно извлечь ход изменения энергии в процессе эволюции. Для этого необходимо выполнить команду File/EnExtract и указать сформированный программой в ходе моделирования лог-файл. При этом сформируется текстовый файл (см. рис. 2.4):



1	50407,8710261605
2	50407,8710261605
3	22646,6114897205
4	22646,6114897205
5	22612,1659938574
6	22550,6449267889

Рис. 2.4. Значение энергии системы на каждом шаге моделирования

Полученный результат работы программы нужно скопировать в OpenOffice Calc (или другую программу, позволяющую строить графики) для построения графической зависимости.

### III. Проведение тестового расчета

Загрузите конфигурационный файл calc.txt нажатием Run/LoadMultiple. Дождитесь окончания процесса моделирования (имейте в виду, что отключение графического отображения процесса моделирования при помощи переключателя Enable on Timer Visualization в разделе Preferences/Visualization существенно увеличивает скорость процесса).

Переведите программу в другой режим работы установкой переключателя Correlation Mode в разделе Preferences/Calculation во включенное состояние. Повторно проведите моделирование загрузкой конфигурационного файла calc.txt.

По окончании моделирования запустите текстовый редактор, используя пункт меню Analysis/Editor, в окне текстового редактора нажмите комбинацию клавиш ctrl+O (открыть) и выберите файл Log\_FelOCol0.txt, находящийся в каталоге Logs папки с программой Nano Monte-Carlo. Повторите операцию с файлом Log\_FelOColO\_1.txt.

Откройте пункт меню File/EnExtract. В открывшемся окне выберите файлы Log\_FelOCol0.txt и Log\_FelOColO\_1.txt. Откройте в текстовом редакторе сформированные файлы En\_Log\_FelOCol0.txt и En\_Log\_FelOColO\_1.txt.

Перейдите на закладку файла En\_Log\_FelOCol0.txt в текстовом редакторе, нажмите комбинации клавиш ctrl+A («Выделить все») и ctrl+C («Скопировать»). Запустите OpenOffice Calc, поставьте курсор в ячейку A1, нажмите комбинацию клавиш ctrl+V («Вставить»). В открывшемся окне импорта данных нажмите «ОК». Выделите первые 2 столбца и запустите «Мастер диаграмм», нажав кнопку «Тип диаграммы» выберите «Диаграмма XY», нажмите «Далее». На открывшемся экране исправьте диапазон данных, если необходимо, и затем нажмите «Готово».

Правой кнопкой мышки нажмите на появившейся диаграмме и выберите из меню пункт «Правка». Затем правой кнопкой мышки нажмите на оси Y диаграммы, в выпадающем списке выберите «Формат оси» и перейдите на закладку «Масштабирование». Предварительно сняв галочки с пунктов «Автоматически», откорректируйте поля «Минимум», «Максимум» и «Основной интервал», для того чтобы диаграмма имела представительный вид. Правой кнопкой мышки нажмите на точках диаграммы и выберите «Формат рядов данных». На вкладке «Линия» раскройте выпадающий список «Выбор» поля «Значок» и выберите подходящий маркер. Аналогично постройте диаграмму для файла En\_Log\_FelOColO\_1.txt. Постройте парные корреляционные функции изучаемых систем. Проведите обсуждение полученных результатов.

#### **IV. Контрольные вопросы к лабораторной работе 2**

1. В чем заключается суть метода «Монте-Карло» по алгоритму Метрополиса?
2. Какие преимущества и недостатки имеет метод «Монте-Карло» по сравнению с методами молекулярной динамики?
3. Для решения каких задач предназначен программный модуль Nano Monte-Carlo?
4. Какие параметры наносистем позволяет исследовать программный модуль Nano Monte-Carlo?

# Лабораторная работа 3

## Компьютерное моделирование процессов плавления наночастиц

**I. Цель работы.** Выполнение компьютерного эксперимента по моделированию динамики плавления наночастиц при помощи программы Fusion.

### II. Порядок выполнения работы

Температура плавления — температура, при которой кристаллическая структура твёрдой фазы исчезает и заменяется неупорядоченным состоянием — жидкой фазой. Для расчёта температуры плавления наночастиц различных форм и размеров используется модуль Fusion.

1. Запустить программный модуль Fusion. Указать в полях программы необходимые данные для расчета:

1.1. Выбирать форму наночастицы, температуру плавления которой необходимо рассчитать.

1.2. Указать высоту монослоя атомов в структуре, в нанометрах.

1.3. Указать температуру плавления массивного образца, в градусах Кельвина.

1.4. Указать параметр  $\alpha$  для наночастицы заданного типа.

1.5. Указать линейные параметры формы наночастицы.

Пример указания параметров для расчёта температуры плавления сферической наночастицы представлен на рис. 3.1.

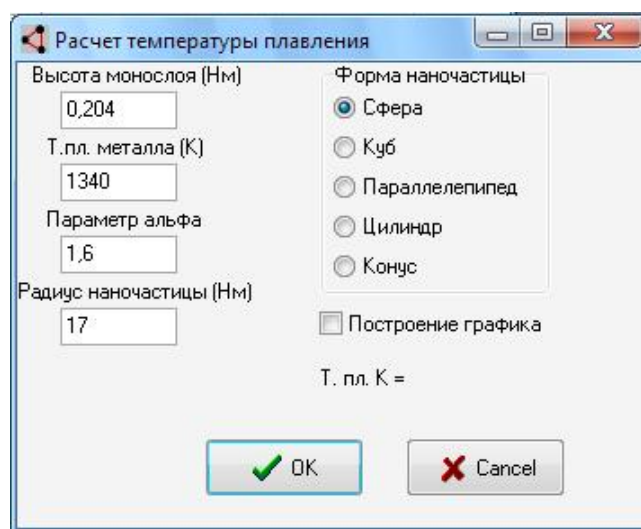


Рис. 3.1. Параметры расчёта температуры плавления сферической наночастицы

2. Нажать кнопку «ОК» и записать результат. Если необходим расчет с выводом графика или таблицы значений, нужно отметить опцию «Построение графика» и в появившемся окне указать шаг расчёта и начальную точку (соответствующую исходному радиусу наночастицы, см. рис. 3.2).

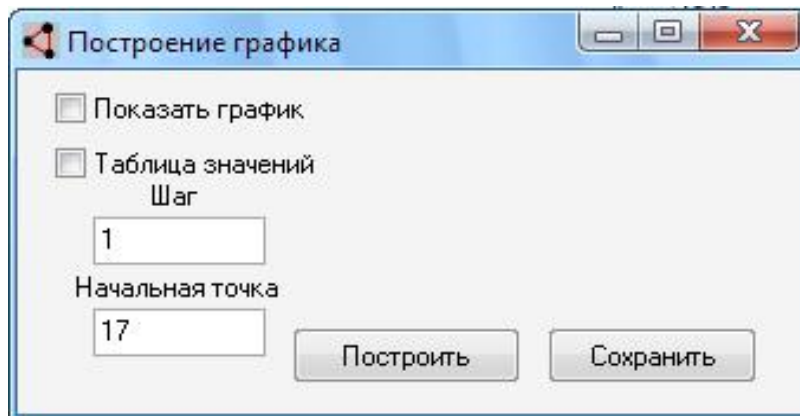


Рис. 3.2. Настройка параметров построения графика

Нажать кнопку «Построить». При выборе опций «Таблица значений» и «Показать график» в соответствующих окнах отобразится таблица зависимости температуры плавления наночастицы от её размера, а также график этой зависимости. Пример графика для сферической наночастицы с заданными параметрами представлен на рис. 3.3.

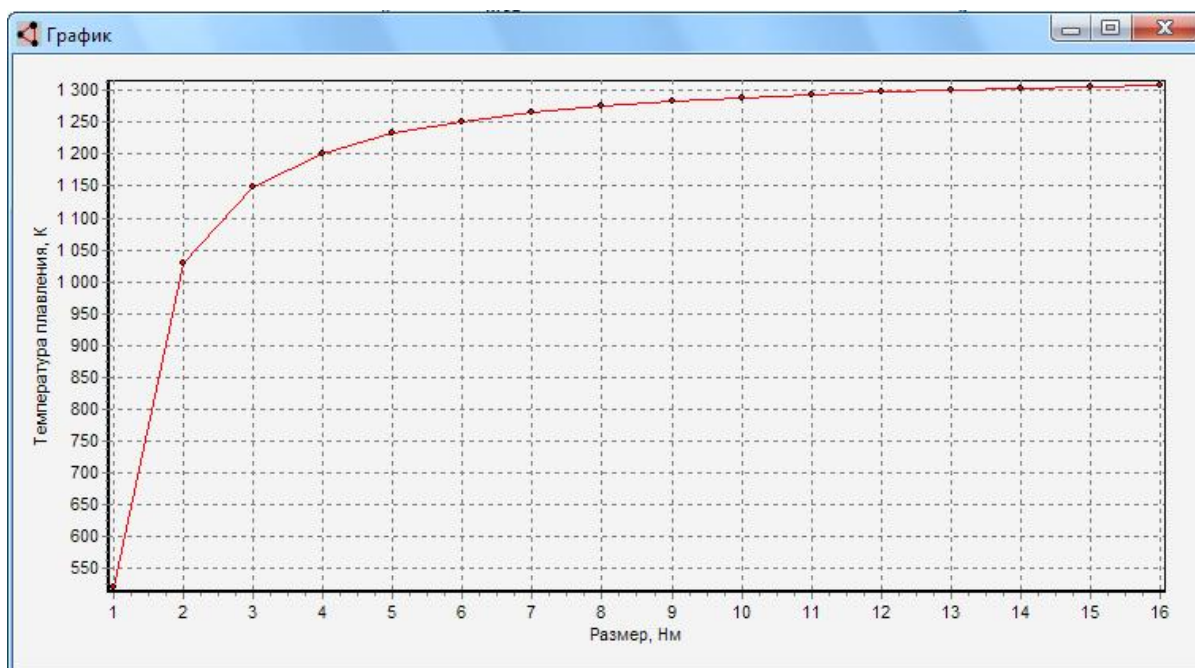


Рис. 3.3. График зависимости температуры плавления наночастицы от её размера



3. Рассчитать температуру плавления для наночастиц, имеющих другую геометрическую форму (куб, параллелепипед, цилиндр, конус). Пример указания параметров для цилиндрической наночастицы представлен на рис. 3.4.

Расчет температуры плавления

Высота монослоя (Нм)  
0,204

Т.пл. металла (К)  
1340

Параметр альфа  
1,6

Радиус цилиндра (Нм)  
17

Длина цилиндра (Нм)  
10

Форма наночастицы

☐ Сфера

☐ Куб

☐ Параллелепипед

☒ Цилиндр

☐ Конус

☐ Построение графика

Т. пл. К = 1310,31

OK Cancel

Рис. 3.4. Параметры расчёта температуры плавления цилиндрической наночастицы

4. Проанализировать полученные результаты. Как меняется температура плавления наночастиц в зависимости от начальной формы частицы и её размеров? Сделать выводы по проделанной работе.

### III. Контрольные вопросы к лабораторной работе 3

1. Дайте определение температуры плавления.
2. От каких факторов зависит температура плавления наночастиц?
3. В чем заключается сложность использования фононной модели?
4. Чем объясняется увеличение температуры плавления наночастиц с уменьшением их размера?

# Лабораторная работа 4

## Дизайн и проектирование самосборки и самоорганизации нанокластеров с помощью модуля «Нанотракты»

**I. Цель работы.** Выполнение компьютерного эксперимента по дизайну и проектированию самосборки и самоорганизации нанокластеров переходных металлов группы железа и углерода.

### II. Порядок выполнения работы

Для моделирования самосборки и самоорганизации нанокластеров создан программный модуль «Нанотракты». Для проведения компьютерного эксперимента необходимо открыть файл «Нанотракты» в табличном редакторе MS Excel, при этом необходимо разрешить макросы в настройках программы. Файл содержит несколько рабочих листов, описание которых приведено ниже.

#### 1. Описание листа «DLA & Relaxation»

синтез кластера по алгоритму ОДА	
10	первоначальная концентрация атомов, %
100	размер области
50	координаты затравочного зерна по оси x
50	координаты затравочного зерна по оси y
210	число агрегированных атомов в кластере

случайное распределение атомов

начать процесс агрегации

	временной шаг
	число диффундирующих атомов
	число агрегированных атомов
	общее число атомов

DLA      сохранить в файл

DLA 130      извлечь из файла

D:\DLA\      адрес каталога

☒ сохранить в файл случайное распределение частиц

☒ сохранять в файл систему агрегированных и блуждающих атомов на каждом временном шаге

Лист состоит из трёх блоков. Первый блок листа имеет название «Синтез кластера по алгоритму ОДА». Иллюстрация настроек данного блока представлена на рис. 4.1.

Рис. 4.1. Блок «Синтез кластера по алгоритму ОДА»



Кнопка «Случайное распределение атомов» необходима для установления начального центра агрегации атомов и задания размера области для агрегации. Сохранение случайного распределения атомов происходит при выставлении флажка «Сохранить в файл случайное распределение частиц».

Кнопка «Начать процесс агрегации» необходима для запуска процесса ограниченной диффузией агрегации (ОДА) до момента формирования кластера с заданным в текстовом поле «Число агрегированных атомов в кластере» числа атомов. Стоит заметить, что кластер может содержать и большее число атомов, т. к. на одном шаге моделирования может произойти агрегация сразу нескольких атомов.

При выставлении флажка «Сохранять в файл систему агрегированных и блуждающих атомов на каждом временном шаге» на каждом временном шаге происходит запись в файл системы атомов. По окончании процесса агрегации сформированную систему атомов можно сохранить при нажатии кнопки «Сохранить в файл». Уже сформированные системы атомов извлекаются из памяти при нажатии кнопки «Извлечь из файла».

Второй блок носит название «Расчёт радиуса обрезания». Иллюстрация настроек данного блока представлена на рис. 4.2.

The screenshot shows a software interface for calculating the cutoff radius. It is divided into two main sections. The top section, titled 'расчёт радиуса обрезания', contains a table of input parameters: '16.6' (1/нм) for 'подгоночная константа', '0.28' (нм) for 'равновесное расстояние', and '0.48' (эВ) for 'глубина ямы'. Below this is a field for 'температура процесса, К' set to '273'. There are also fields for 'радиус обрезания' and 'R/R0' (set to 'нм'). The bottom section contains buttons for 'перевод массива в пространственные координаты', 'сохранить в файл пространственные координаты' (with a 'prk' field), and 'создать и сохранить матрицу смежности' (with an 'ms' field). It also has a file path field 'D:\rel\' labeled 'адрес каталога', fields for 'число межатомных связей', 'внутренняя энергия кластера' (with 'эВ' and 'эВ/атом' units), and a section for 'расчёт размеров и границ области кластера' with fields for 'xmin', 'ymin', and 'размер области'.

Рис. 4.2. Блок «Расчёт радиуса обрезания»

В текстовых полях «Подгоночная константа», «Равновесное расстояние», «Глубина ямы» выставляются параметры потенциала Морзе для взаимодействия между атомами никеля. Температура, при которой моделируется процесс, выставляется в текстовом поле «Температура процесса, К».

При нажатии на кнопку «Радиус обрезания» происходит вычисление значения радиуса обрезания при заданной температуре. Нажатие кнопки «Перевод массива в пространственные координаты» приводит в действие подпрограмму, рассчитывающую координаты атомов, основываясь на уже вычисленном массиве данных.

Сохранение рассчитанных координат происходит при нажатии на кнопку «Сохранить в файл пространственные координаты».

Нажатием кнопки «Создать и сохранить матрицу смежности» активизируется подпрограмма, рассчитывающая на основании значения радиуса обрезания и значений пространственных координат матрицу смежности.

Нажатием кнопки «Число межатомных связей» вычисляется число связей, существующих между агрегированными атомами при заданной температуре. При нажатии на кнопку «Внутренняя энергия кластера» происходит вычисление энергии связей внутри кластера.

Кнопка «Расчёт размеров и границ области кластера» служит для выполнения расчёта минимального и максимального значений границ оптимальной области и размера оптимальной области.

Третий блок — «Энергетическая релаксация при заданной температуре». Иллюстрация настроек данного блока представлена на рис. 4.3.

Рис. 4.3. Блок «Энергетическая релаксация при заданной температуре»

В текстовом поле «Шаг трансляции, нм» выставляется значение шага трансляции в нм, при котором будет происходить процесс моделирования. В текстовом поле «Градиент энергии» выставляется абсолютное значение разности между потенциальными энергиями кластеров на соседних временных шагах в формируемых системах атомов в процессе релаксации, при достижении которого процесс релаксации завершится.

Выставление флажка «Сохранять на каждом временном шаге релаксации» обеспечивает сохранение на каждом шаге моделирования пространственных координат, матрицы смежности, числа связей и внутренней энергии.

В текстовом поле «Время начала процесса» отображается время начала моделирования. В текстовом поле «Время текущего процесса» отображается время текущего шага моделирования. В текстовом поле «Номер атома» отображается номер атома, для которого производится расчёт. В текстовом поле «Число атомов в кластере» отображается число атомов в системе.

Кнопка «Извлечь пространственные координаты из файла» служит для извлечения координат атомов системы для процесса релаксации. Кнопка «Извлечь матрицу смежности» предназначена для извлечения из файла созданной матрицы смежности. При нажатии кнопки «Начать процесс релаксации» начинается расчёт релаксации.

## **2. Описание листов для расчёта свойств моделируемой системы атомов**

На листе «D & t» нажатием кнопки «Фрактальная размерность на каждом временном шаге» осуществляется расчёт на каждом временном шаге самосборки и выводится график зависимости.

На листе «S & t» при нажатии кнопки «Энтропия на каждом временном шаге» происходит вычисление значений энтропии на каждом временном шаге самосборки и отображается график, причём при активизации переключателя «Ввод числа ячеек в сетке» происходит расчёт энтропии с числом ячеек, указанных в текстовом поле, а при активизации переключателя «Автоматический выбор числа ячеек» вычисление энтропии происходит при числе ячеек в сетке, вычисленном автоматически.

На листе «E & t» нажатие кнопки «Внутренняя энергия на каждом временном шаге» активизирует процесс расчёта энергии связей в системе атомов. После завершения расчётов отображается график зависимости.

На листе «F & t» значения свободной энергии системы атомов вычисляются при нажатии кнопки «Свободная энергия на каждом временном шаге». При активизации переключателя «Ввод числа ячеек в сетке» происходит расчёт энтропии с числом ячеек, указанных в текстовом поле, а при активизации переключателя «Автоматический выбор числа ячеек» вычисление энтропии происходит при числе ячеек в сетке, вычисленном автоматически. После завершения расчётов отображается график зависимости.

На листе «N & t» значения числа связей рассчитываются при нажатии кнопки «Число связей на каждом временном шаге». После завершения расчётов отображается график зависимости.

На листе «D & tr» расчёт фрактальной размерности для системы атомов на шагах моделирования релаксации начинается при нажатии кнопки «фрактальная размерность на каждом шаге релаксации». После завершения расчётов отображается график зависимости.

Энтропия системы атомов на стадии релаксации рассчитывается на листе «S & tr» при нажатии кнопки «Энтропия на каждом временном шаге релаксации». При активизации переключателя «Ввод числа ячеек в сетке» происходит расчёт энтропии с числом ячеек, указанных в текстовом поле, а при активизации переключателя «Автоматический выбор числа ячеек» вычисление энтропии происходит при числе ячеек в сетке, вычисленном автоматически. После завершения расчётов отображается график зависимости.

Энергия связей системы атомов в процессе релаксации рассчитывается на листе «E & tr» при нажатии кнопки «Внутренняя энергия на каждом временном шаге релаксации». После завершения расчётов отображается график зависимости.

Свободная энергия вычисляется на листе «F & tr» при нажатии кнопки «Свободная энергия на каждом шаге релаксации». После завершения расчётов отображается график зависимости.

На листе «N & tr» при нажатии кнопки «Число связей на каждом временном шаге релаксации» осуществляется расчёт числа связей на каждом шаге моделирования. После завершения расчётов отображается график зависимости.

### 3. Описание листа «2D DLA»

Лист «2D DLA» выполнен в виде отдельного приложения, служащего для визуализации процесса агрегации атомов. Его вид представлен на рис. 4.4.

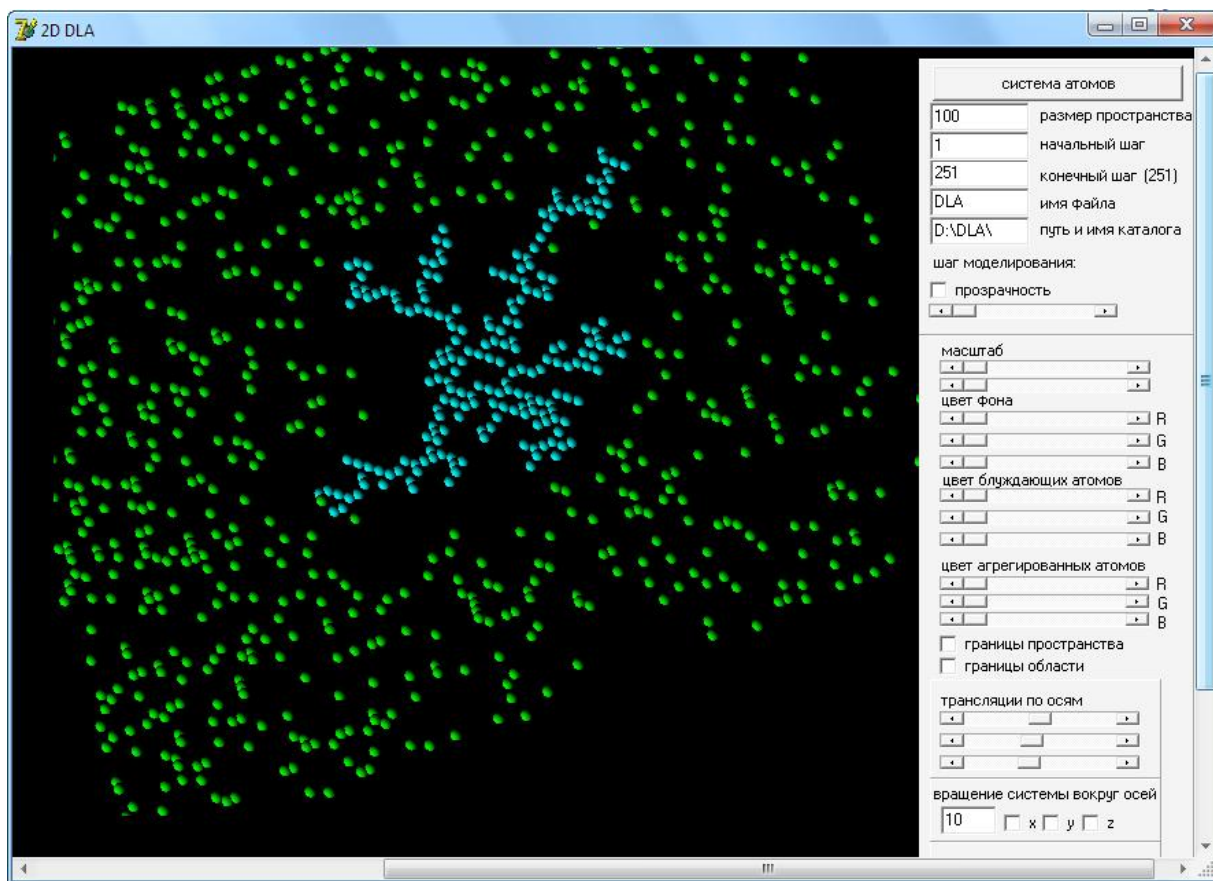


Рис. 4.4. Визуализация агрегации атомов на листе «2D DLA»

Кнопка «Система атомов» служит для начала отображения структур самосборки, сформированных по алгоритму ограниченной диффузией агрегации.

Текстовое поле «Размер пространства» отображает число клеток соответствующих длине квадратной области.

Текстовое поле «Начальный шаг» служит для задания начального значения шага моделирования, с которого необходимо начинать визуализировать процесс.

Текстовое поле «Конечный шаг» необходимо для внесения значения, соответствующего конечному шагу моделирования. Справа в скобках выводится общее число шагов моделирования.

Текстовое поле «Имя файла» предназначено для внесения в него названия файла, который необходимо извлекать при визуали-

зации. Текстовое поле «Путь и имя каталога» необходимо для введения в него адреса каталога, из которого будут извлечены файлы.

Строка «Шаг моделирования» выполняет функцию отображения номера шага моделирования для текущего извлекаемого файла.

Флажок «Прозрачность» необходим для переключения отображения атомов в режим прозрачного восприятия поверхностей сфер, а соответствующая полоса прокрутки необходима для варьирования параметра прозрачности от 1 до 0.

Две полосы прокрутки «Масштаб» предназначены для изменения масштаба отображаемой системы. Полосы прокрутки «Цвет фона» предназначены для изменения окраски фона по трём основным цветам: красный («R»), зелёный («G»), синий («B»).

Полосы прокрутки «Цвет блуждающих атомов» предназначены для изменения окраски блуждающих атомов по трём основным цветам: красный («R»), зелёный («G»), синий («B»). Полосы прокрутки «Цвет агрегированных атомов» предназначены для изменения окраски агрегированных атомов по трём основным цветам: красный («R»), зелёный («G»), синий («B»).

Флажок «Границы пространства» необходим при визуализации внешних границ отображения. Флажок «Границы области» предназначен для отображения границ области, в которой моделировался процесс.

Полосы прокрутки «Трансляции по осям» выполняют функцию смещения системы по трём основным координатным осям.

Флажки «x», «y» и «z» служат для визуализации системы при вращении её вокруг осей x, y, z с временным интервалом смещения на 1 градус угла, заданным в соответствующем текстовом поле.

Полосы прокрутки «Параметры проекции» необходимы для варьирования параметров перспективной проекции отображаемой системы.

#### **4. Описание листа «2D Relaxation»**

Лист «2D Relaxation» выполнен в виде отдельного приложения, служащего для визуализации процесса релаксации фрактального кластера. Его вид представлен на рис. 4.5.



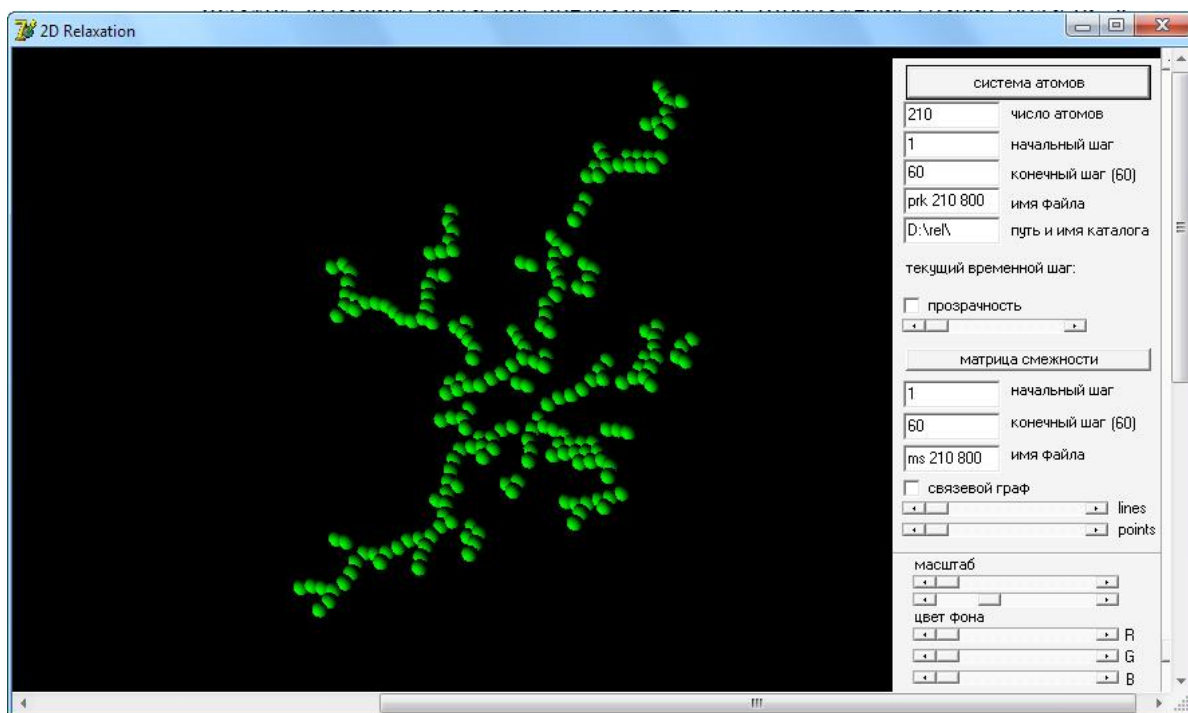


Рис. 4.5. Визуализация релаксации кластера на листе «2D DLA»

Кнопка «Система атомов» служит для начала отображения структур, сформированных в процессе релаксации.

Текстовое поле «Число атомов» отображает число атомов в системе и заполняется автоматически. Текстовое поле «Начальный шаг» предназначено для введения значения шага моделирования, с которого начнётся процесс отображения системы атомов. Текстовое поле «Конечный шаг» служит для внесения значения конечного шага моделирования. Справа в скобках указано общее число шагов. Текстовое поле «Имя файла» заполняется автоматически и отображает имя файла, который был записан в память при моделировании процесса релаксации. Текстовое поле «Путь и имя каталога» предназначено для внесения адреса каталога, в котором сохранены структуры.

Строка «Текущий временной шаг» отображает шаг моделирования.

Флажок «Прозрачность» необходим для переключения отображения атомов в режим прозрачного восприятия поверхностей сфер, а соответствующая полоса прокрутки необходима для варьирования параметра прозрачности от 1 до 0.

Кнопка «Матрица смежности» необходима для выполнения отображения связевого графа на каждом из указанных шагов моделирования. Текстовое поле «Начальный шаг» предназначено

для введения значения шага моделирования, с которого начнётся процесс отображения связевого графа системы атомов. Текстовое поле «Конечный шаг» служит для внесения значения конечного шага моделирования. Справа в скобках указано число общее шагов. Текстовое поле «Имя файла» заполняется автоматически и отображает имя файла, соответствующего матрице смежности, который был записан в память при моделировании процесса релаксации.

Флажок «Связевой граф» предназначен для переключения внутренних вычислений на отображение связевого графа и выставляется автоматически.

Полоса прокрутки `lines` предназначена для варьирования толщины линий в связевом графе. Полоса прокрутки `points` предназначена для варьирования размеров точек в связевом графе, соответствующих атомам. Полосы прокрутки «Масштаб» служат для изменения масштаба системы. Полосы прокрутки «Цвет фона» необходимы для изменения цвета фоновой области по трём основным цветам. Полосы прокрутки «Цвет атомов» предназначены для изменения окраски атомов системы или линий, точек в связевом графе по трём основным цветам.

Флажок «Границы пространства» необходим при визуализации внешних границ отображения. Флажок «Границы области» предназначен для отображения границ области, в которой моделировался процесс.

Текстовое поле `xmin` отображает минимальную координату по оси  $x$  и отображается автоматически. Текстовое поле `umin` отображает минимальную координату по оси  $y$  и отображается автоматически. Текстовое поле «Размер области» показывает размер минимальной области, в которой протекает изохорно-изотермический процесс релаксации, и заполняется автоматически.

Полосы прокрутки «Трансляции по осям» выполняют функцию смещения системы по трём основным координатным осям.

Флажки « $x$ », « $y$ » и « $z$ » служат для визуализации системы при вращении её вокруг осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$  с временным интервалом смещения на 1 градус угла, заданным в соответствующем текстовом поле.

Полосы прокрутки «Параметры проекции» необходимы для варьирования параметров перспективной проекции отображаемой системы.



### **III. Выполнение компьютерного эксперимента по проектированию самосборки и самоорганизации нанокластеров переходных металлов**

Осуществим необходимые расчёты на следующем примере.

1. Выполнить синтез ОДА виртуального кластера и дальнейшее компьютерное моделирование процесса релаксации системы атомов, задав концентрацию атомов равную 10 % при размере области 100x100 клеток с начальными координатами (50, 50).

Релаксацию провести для кластера, состоящего из 210 атомов, выставив число агрегированных атомов в кластере равным 210.

Выставить флажки «Сохранять в файл систему агрегированных и блуждающих частиц на каждом временном шаге» и «Сохранить в файл случайное распределение частиц». Задать случайное распределение атомов и запустить процесс агрегации.

После достижения либо превышения числа агрегированных атомов, равного выставленному числу агрегированных атомов, процесс агрегации прекратится.

Произвести визуализацию полученной системы атомов на любом из шагов процесса ОДА либо в течение выбранного интервала временных шагов с помощью файла «2D DLA».

2. Рассчитать параметры уже синтезированных систем атомов.

На листе «D & t» произвести расчёт значений фрактальной размерности. На листе «S & t» необходимо произвести вычисление значения энтропии на каждом шаге. На листе «E & t» произвести вычисление энергии связей. На листе «F & t» осуществить нахождение свободной энергии. На листе «N & t» провести расчёт числа связей в кластере. Проанализировать графики зависимости.

3. Перейти на лист «DLA & Relaxation».

Для подготовки системы агрегированных атомов к последующему процессу релаксации необходимо выполнить последовательность следующих действий.

Произвести расчёт радиуса обрезания при температуре 273 К, выставив соответствующие значения параметров потенциала.

Извлечь файл конечной структуры процесса агрегации с помощью кнопки «Извлечь из файла», задав в соответствующем текстовом поле имя файла системы на конечном шаге процесса ОДА, например «DLA 251».

Перевести массив, соответствующий системе блуждающих и агрегированных атомов на конечном шаге моделирования, в координаты и запомнить в файл. Провести расчет матрицы смежности и записать в файл.

Рассчитать число межатомных связей, внутреннюю энергию, вычислить размеры и границы области кластера, нажав на соответствующие кнопки.

4. Промоделировать процесс энергетической релаксации при заданной температуре следующим образом. На первом этапе осуществить извлечение координат и матрицы смежности из файлов. Выставить флажок «Сохранять на каждом временном шаге релаксации». Установив шаг трансляции равным 0.1 нм и градиент энергии сходимости результата равным 0.01 нм, перейти к моделированию процесса релаксации.

На каждом временном шаге отображается временной шаг, номер атома и его координаты, внутренняя энергия, время начала процесса и текущее время шага моделирования. На каждом временном шаге происходит сохранение координат, матрицы смежности, числа межатомных связей и внутренней энергии.

Процесс релаксации будет продолжаться до тех пор, пока разность между двумя значениями энергии кластера не станет меньше указанного значения градиента энергии.

Произвести визуализацию полученной системы атомов и связевого графа на любом из шагов процесса релаксации либо в диапазоне шагов моделирования. Рассчитать параметры уже синтезированных систем атомов.

5. На листе «D & tr» рассчитать значения фрактальной размерности и проанализировать график зависимости. На листе «S & tr» рассчитать значения энтропии и проанализировать график зависимости. На листе «E & tr» рассчитать значения энергии связей и проанализировать график зависимости. На листе «F & tr» рассчитать значения свободной энергии и проанализировать график зависимости. На листе «N & tr» рассчитать значения числа связей и проанализировать график зависимости.

6. Выполнить моделирование релаксации при температуре 500 К.

Перейти на лист «DLA & Relaxation». Осуществить извлечение координат и матрицы смежности из файлов и произвести модели-

рование процесса релаксации при температуре 500 К, задав данное значение температуры в текстовом поле «Температура процесса, К» и произведя расчёт радиуса обрезания. Произвести визуализацию полученной системы атомов и связевого графа в диапазоне шагов моделирования, произвести вычисления параметров.

7. Выполнить моделирование релаксации при температуре 1000 К.

Перейти на лист «DLA & Relaxation». Осуществить извлечение координат и матрицы смежности из файлов и произвести моделирование процесса релаксации при температуре 1000 К, задав данное значение температуры в текстовом поле «Температура процесса, К» и произведя расчёт радиуса обрезания. Произвести визуализацию полученной системы атомов и связевого графа в диапазоне шагов моделирования. Произвести вычисления параметров.

8. Выполнить моделирование релаксации при температуре 1500 К.

Перейти на лист «DLA & Relaxation». Осуществить извлечение координат и матрицы смежности из файлов и произвести моделирование процесса релаксации при температуре 1500 К, задав данное значение температуры в текстовом поле «Температура процесса, К» и произведя расчёт радиуса обрезания. Произвести визуализацию полученной системы атомов и связевого графа в диапазоне шагов моделирования.

Произвести вычисления параметров, сделать вывод о влиянии температуры на ход процесса релаксации.

#### **IV. Анализ результатов компьютерного эксперимента**

В ходе анализа результатов работы необходимо убедиться в следующем.

1. Процессы релаксации системы атомов никеля идут самопроизвольно, что следует из значений свободной энергии.

2. Процессы самосборки и релаксации сопровождаются снижением энтропии, что указывает на процессы упорядочения в системе.

3. В процессах самосборки и релаксации система атомов переходит в более неравномерное и компактное состояние в пространстве, при этом значение фрактальной размерности снижается, что позволяет связать отрицательный градиент значений с процессами самоорганизации в системе.

## **V. Контрольные вопросы к лабораторной работе 4**

1. На каких основаниях подтверждается самопроизвольность моделируемых процессов?
2. Как зависят значения свободной энергии от температуры?
3. Чем подтверждается наличие процессов упорядочения в системе атомов?
4. Чем вызвано изменение значений фрактальной размерности на последовательных шагах моделирования?
5. С какой величиной можно связать различные зависимости числа связей от шагов моделирования при различных температурах?

## **Лабораторная работа 5**

### **Самосборка и самоорганизация неравновесных гелей наночастиц с помощью модуля «Нанотфракталы»**

**I. Цель работы.** Выполнение компьютерного эксперимента самосборки и самоорганизации неравновесных гелей наночастиц с помощью модуля «Нанотфракталы».

#### **II. Порядок выполнения работы**

Для моделирования самосборки и самоорганизации неравновесных гелей наночастиц создан программный модуль «Нанотфракталы». Алгоритм формирования агрегатов представлен разновидностью модели кластер-кластерной агрегации (ККА): модель диффузионно-контролируемой кластер-кластерной агрегации (DLCA).

Для проведения компьютерного эксперимента необходимо открыть файл «Нанотфракталы» в табличном редакторе MS Excel, при этом необходимо разрешить макросы в настройках программы. Файл содержит несколько рабочих листов, описание которых приведено ниже.

#### **1. Описание листа «ССА 3D»**

Данный лист содержит основные параметры, устанавливаемые при моделировании процесса самосборки. Вид листа представлен на рис. 5.1.

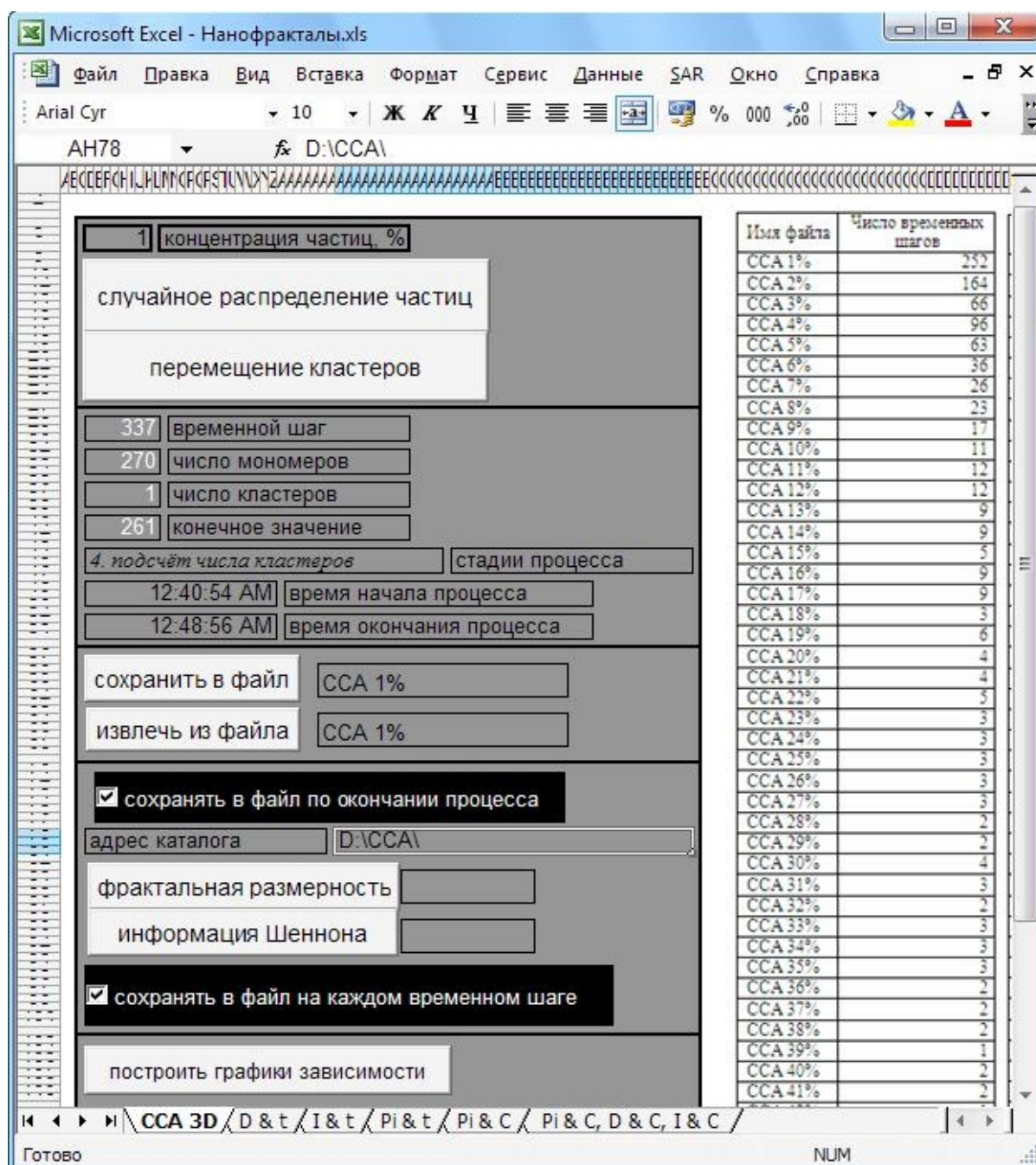


Рис. 5.1. Задание параметров самоорганизации кластера на листе «CCA 3D»

Текстовое поле «Концентрация частиц, %» необходимо для внесения в него значения первоначальной объёмной концентрации частиц. Нажатием кнопки «Случайное распределение частиц» запускается процесс распределения частиц в объёме пространства в хаотическом порядке. При нажатии кнопки «Перемещение кластеров» начинается процесс хаотического перемещения как отдельных частиц, так и кластеров, формируемых в ходе процесса.

В текстовом поле «Временной шаг» происходит отображение шага моделирования. Текстовое поле «Число мономеров» показывает количество первоначально заданных частиц и их количество в ходе проведения эксперимента. Текстовое поле «Число кластеров» показывает общее число кластеров на каждом временном шаге процесса. Текстовое поле «Конечное значение» отображает присвоенное значение сформированного агломерата и связано со спецификой алгоритмов моделирования. Стадии процесса отображаются в текстовом поле «Стадии процесса».

Сохранение в текстовый файл и извлечение из текстового файла координат частиц конечной структуры осуществляется при нажатии кнопок «Сохранить в файл» и «Извлечь из файла». Поле «Путь и название папки» определяет адрес сохранения файла.

Автоматическое сохранение в файл на каждом временном шаге осуществляется при выставлении флажка «Сохранять на каждом временном шаге». Сохранение в файл конечной структуры осуществляется при выставлении флажка «Сохранить по окончании процесса». Расчёт значения фрактальной размерности осуществляется при нажатии кнопки «Фрактальная размерность». Информация Шеннона для конечного агломерата частиц рассчитывается при нажатии на кнопку «Информация Шеннона». При этом на листе « $P_i$  & C, D & C, I & C» отображается значение информации Шеннона и частотности вершины того или иного типа.

При нажатии кнопки «Построить графики зависимости» на листе « $P_i$  & C, D & C, I & C» отображаются значения частотностей, фрактальной размерности и информации Шеннона для каждой концентрации частиц (при нажатии кнопки «Найти максимальное значение информации» происходит вычисление и выделение максимального значения информации Шеннона).

## **2. Описание листов для расчёта свойств моделируемой системы атомов**

На листе «D & t» в соответствующих текстовых полях задаются имена файла, каталога и значение числа временных шагов. При нажатии кнопки «Фрактальная размерность на каждом временном шаге» происходит расчёт значений фрактальной размерности системы частиц на каждом временном шаге моделирова-

ния. После отображения рассчитанных значений происходит построение графика зависимости.

На листе «I & t» в соответствующих текстовых полях задаются имена файла, каталога и значение числа временных шагов. При нажатии кнопки «Информация Шеннона на каждом временном шаге» происходит расчёт значений информации Шеннона системы частиц на каждом временном шаге моделирования. После отображения рассчитанных значений происходит построение графика зависимости.

На листе «Pi & t» в соответствующих текстовых полях задаются имена файла, каталога и значение числа временных шагов. При нажатии кнопки «Частота появления вершин на каждом временном шаге» происходит расчёт значений частот появления вершин для системы частиц на каждом временном шаге моделирования. При этом максимальные значения выделяются рамкой, а в левом столбце отображается число максимумов.

На листе «Pi & C» в соответствующем текстовом поле задается имя и адрес каталога. При нажатии кнопки «Частота появления вершин при каждом значении концентрации частиц» происходит расчёт значений частот появления вершин для системы частиц для каждой концентрации частиц от 1 % до 100 % с шагом в 1 %. При этом максимальные и минимальные значения выделяются рамками. В левых крайних столбцах отображается количество максимумов и минимумов. Ниже отображаются значения массивов максимумов и минимумов: 0 обозначает отсутствие экстремумов, 1 — максимум, 2 — минимум.

### **3. Описание листа «3D CCA»**

Лист «3D CCA» выполнен как отдельное приложение, служащее для трехмерной визуализации процесса самосборки фрактального кластера. Его вид представлен на рис. 5.2.

Кнопка «Визуализация структур» предназначена для извлечения файлов с последующей визуализацией структур, синтезированных по алгоритму диффузионно-ограниченной кластер-кластерной агрегации. Текстовое поле «Начальный шаг» необходимо для внесения номера шага моделирования, с которого начинается процесс визуализации системы. Текстовое поле «Конечный шаг» предназначено для указания шага моделирования,



на котором необходимо остановить процесс. Текстовое поле «Имя файла» служит для внесения в него имени вызываемого файла. Текстовое поле «Путь и имя каталога» служит для указания имени диска и каталога, где расположены файлы.

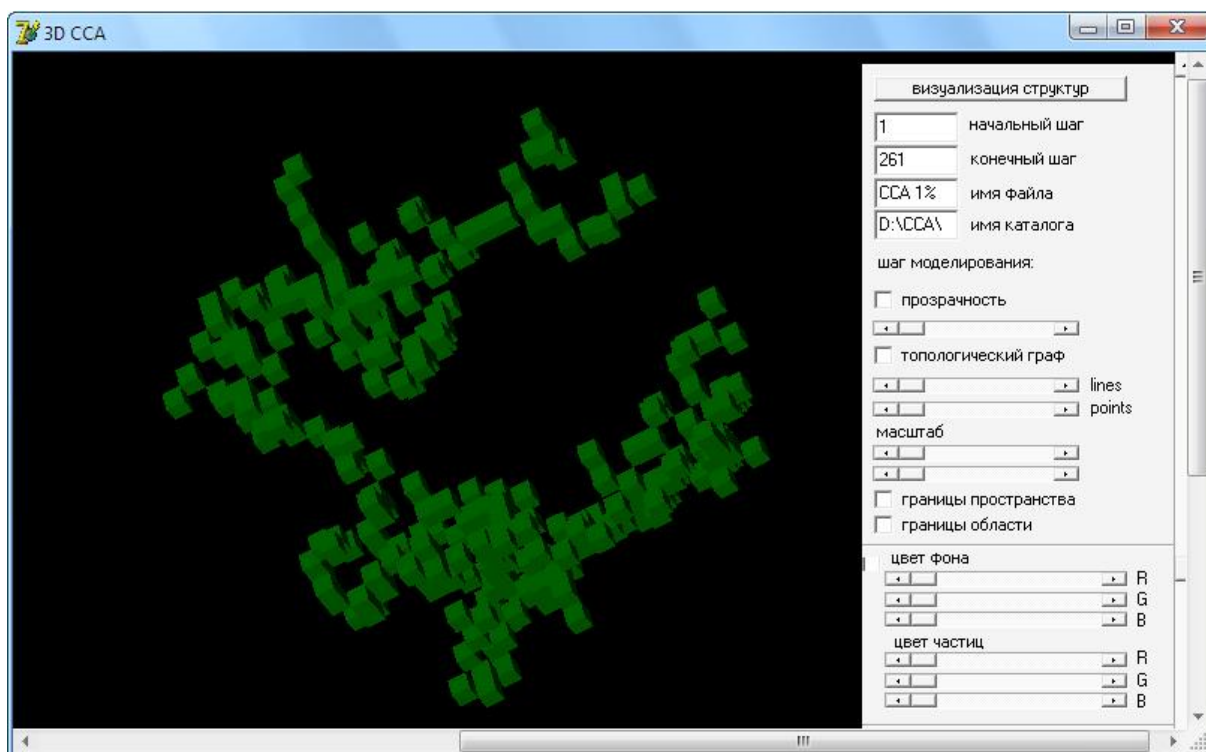


Рис. 5.2. Трехмерная визуализация самосборки кластера на листе «3D CCA»

Строка «Шаг моделирования» выполняет функцию отображения номера шага моделирования визуализируемой системы. При выставлении флажка «Прозрачность» система частиц отображается в долях прозрачности от 1 до 0 и варьируется соответствующей полосой прокрутки. При выставлении флажка «Топологический граф» система визуализируется в виде топологического графа.

Полоса прокрутки *lines* предназначена для варьирования толщины линий в топологическом графе. Полоса прокрутки *points* предназначена для варьирования размеров точек в топологическом графе, соответствующих частицам. Полосы прокрутки «Масштаб» служат для изменения масштаба системы.

Флажок «Границы пространства» необходим при визуализации внешних границ отображения. Флажок «Границы области» предназначен для отображения границ области, в которой моделировался процесс.



Полосы прокрутки «Цвет фона» необходимы для изменения цвета фоновой области по трём основным цветам. Полосы прокрутки «Цвет частиц» предназначены для изменения окраски частиц структуры или линий, точек в топологическом графе по трём основным цветам. Полосы прокрутки «Трансляции по осям» выполняют функцию смещения системы по трём основным координатным осям.

Флажки «x», «y» и «z» служат для визуализации системы при вращении её вокруг осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$  с временным интервалом смещения на 1 градус угла, заданным в соответствующем текстовом поле.

Полосы прокрутки «Параметры проекции» необходимы для варьирования параметров перспективной проекции отображаемой системы.

### **III. Выполнение компьютерного эксперимента по самосборке и самоорганизации неравновесных гелей наночастиц**

1. Провести компьютерный синтез для структуры при концентрации частиц 2 %. Для этого в соответствующем текстовом поле ввести значения концентрации. Выставить флажки для сохранения системы частиц на каждом временном шаге и по окончании процесса.

2. На листе « $D \& t$ » провести расчёт значений фрактальной размерности на каждом шаге моделирования и проанализировать график.

3. Рассчитать информацию Шеннона на каждом шаге моделирования, используя возможности листа « $I \& t$ ». Проанализировать график зависимости.

4. Вычислить значения частот вершин на каждом шаге моделирования на листе « $P_i \& t$ ». Проследить изменение величины максимума и его принадлежность тому или иному типу вершин.

5. Перейдя на лист « $P_i \& C$ », рассчитать значения частот вершин для структур на конечных шагах моделирования при различных концентрациях от 1 % до 100 % с интервалом 1 %.

6. Перейти на лист «ССА 3D» и, нажав на кнопку «Построить графики зависимости», на листе « $P_i \& C$ ,  $D \& C$ ,  $I \& C$ » проанализировать вычисляемые данные и соответствующие графики за-

висимости. Найти максимальное значение информации и соответствующую ей концентрацию.

7. Визуализировать процесс самосборки в файле «3D CCA».

#### **IV. Анализ результатов компьютерного эксперимента**

В ходе анализа результатов работы необходимо убедиться в следующем.

1. Выявлены четыре типа наноструктур на основании принципа сигнатуры и частоты распределения вершин.

2. Снижение значений фрактальной размерности в процессе самосборки указывает на переход системы частиц в более плотное расположение в пространстве.

3. Повышение значений информации Шеннона в процессе самосборки указывает на образование более стабильных структур.

4. Структуры, синтезированные при заданных концентрациях частиц, обладают максимальными либо минимальными значениями информации Шеннона, что связано с высотой пика графика распределения частот.

5. Увеличение фрактальной размерности при увеличении концентрации частиц связывается с более плотным расположением частиц в пространстве.

#### **V. Контрольные вопросы к лабораторной работе 5**

1. Каково количество типов вершин, различающихся числом соседей, в рассматриваемых моделируемых системах?

2. Сколько типов структур выделено на основании числа пиков на графике распределения частот?

3. Определите, как изменяется состояние системы частиц в течение процесса самосборки, исходя из значений информации Шеннона и фрактальной размерности.

4. Каковы зависимости информации Шеннона и фрактальной размерности от начальной концентрации частиц?

## Литература

1. Многоуровневое строение, физико-химические и информационные свойства вещества / С. А. Безносюк, А. И. Потекаев, М. С. Жуковский, Т. М. Жуковская, Л. В. Фомина. — Томск : НТЛ, 2005. — 264 с.
2. Рит, М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета / М. Рит ; пер. с англ. — М. ; Ижевск : НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. — 160 с.
3. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике : в 2 т. / Х. Гулд, Я. Тобочник ; пер. с англ. — М. : Мир, 1990.
4. Гусев, А. И. Нанокристаллические материалы : методы получения и свойства / А. И. Гусев. — Екатеринбург : УрО РАН, 1998. — 199 с.
5. Еремеев, С. В. Эффективные многочастичные межатомные потенциалы в молекулярно-динамическом моделировании / С. В. Еремеев // Изв. вузов. Физика. — 2005. — № 6. — С. 82–90.
6. Крокстон, К. Физика жидкого состояния. Статистическое введение / К. Крокстон ; пер. с англ. ; под ред. А. Г. Башкирова, Н. В. Вдовиченко. — М. : Мир, 1978. — 400 с.
7. Сергеев, Г. Б. Нанохимия : учеб. пособие / Г. Б. Сергеев. — М. : КДУ, 2006. — 336 с.
8. Соболев, И. М. Численные методы Монте-Карло / И. М. Соболев. — М. : Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1973. — 312 с.
9. Физика простых жидкостей. Экспериментальные исследования / под ред. Г. Темперли ; пер. с англ. под ред. А. З. Голика. — М. : Мир, 1973. — 400 с.
10. Хеерман, Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / Д. В. Хеерман ; пер. с англ. В. Н. Задкова ; под ред. С. А. Ахманова. М. : Наука, 1990. — 175 с.
11. Мокроусов, Г. М. Перестройка твердых тел на границах раздела фаз / Г. М. Мокроусов. — Томск : Изд-во ТГУ, 1990. — 230 с.
12. Лозовик, Ю. Е. Исследование ориентационного плавления и термодинамических свойств наночастицы методом молекулярной динамики / Ю. Е. Лозовик // ФТТ. — 2002. — Т. 44. Вып. 1. — С. 22–26.
13. Коротков, П. К. Размерный эффект контактного плавления металлов / П. К. Коротков // ПЖТФ. — 2006. — Т. 32. Вып. 2. — С. 28–32.
14. Лифшиц, В. Г. Процессы на поверхности твердых тел / В. Г. Лифшиц. — Владивосток : Дальнаука, 2003. — 704 с.
15. Бейдер, Р. Атомы в молекулах : Квантовая теория / Р. Бейдер ; пер. с англ. — М. : Мир, 2001. — 532 с.

## Оглавление

Лабораторная работа 1. Дизайн и проектирование самосборки и самоорганизации неравновесных наносистем.....	3
Лабораторная работа 2. Дизайн и проектирование самосборки и самоорганизации нанокластеров с использованием программного модуля Nano Monte-Carlo .....	15
Лабораторная работа 3. Компьютерное моделирование процессов плавления наночастиц .....	21
Лабораторная работа 4. Дизайн и проектирование самосборки и самоорганизации нанокластеров с помощью модуля «Нанотракты» .....	24
Лабораторная работа 5. Самосборка и самоорганизация неравновесных гелей наночастиц с помощью модуля «Нанотракты» .....	36
Литература .....	43

---

Учебное издание

**Компьютерное моделирование  
в химии наноразмерных структур**

Учебно-методическое пособие

Составитель  
**Цивов Алексей Владимирович**

Редактор, корректор М. Э. Левакова  
Верстка М. Э. Леваковой

Подписано в печать 28.02.17. Формат 60×84 1/16.

Усл. печ. л. 2,56. Уч.-изд. л. 1,5.

Тираж 4 экз. Заказ

Оригинал-макет подготовлен  
в редакционно-издательском отделе ЯрГУ

Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова.  
150000, Ярославль, ул. Советская, 14.