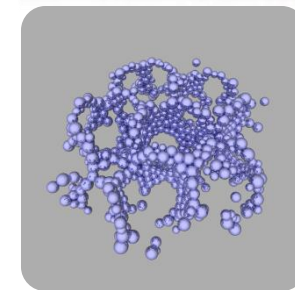
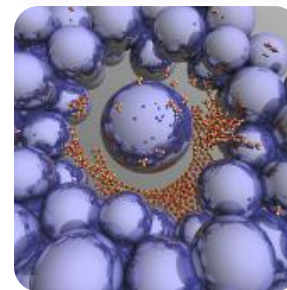
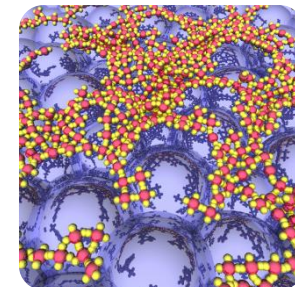
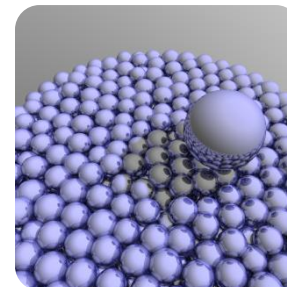


ВИРТУАЛЬНЫЙ ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ

На базе учебно-методического программного комплекса
«Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»



Комплекс разработан при поддержке Федерального агентства по науке и инновациям в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» (ГК № 02.523.11.3014).

Учебно-методический программный комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»



The screenshot shows the nanoModel 2.0 website interface. At the top, there is a navigation bar with links: Главная, Методии, Эксперименты, Журнал, Мои документы, and Симулятор микроскопа New!!!. The main content area features a large image of a nanoscale structure and a text block titled "Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях". Below this, there are sections for "Решения для вузов" and "Контакты". At the bottom, there are four small images representing different modeling techniques: "Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях", "Конструирование и исследование свойств наночастиц", "Моделирование наноструктурированных материалов", and "Имитационное моделирование диффузионных процессов в мембранах".

Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях

Учебно-методический программный комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях» - это современный электронный ресурс, обеспечивающий высокий уровень качества обучения. Комплекс содержит программные модули и учебно-методические материалы по компьютерному моделированию в нанотехнологиях, разработанные при участии ведущих научных коллективов страны.

Решения для вузов

- Поставка и внедрение комплекса во внутреннюю сеть вуза
- Стабильная производительность независимо от ширины Интернет-канала
- Множество вариантов комплектаций для лабораторий, компьютерных классов и центров коллективного пользования
- Платформа для проведения курсов ДПО
- Виртуальные лабораторные практикумы онлайн

Контакты

ООО «СИАМС», Екатеринбург
ул. Коминтерна д. 16, 6 этаж
тел: (343) 379-00-34 (35,36)
e-mail: info@siams.com
web: siams.com

Центр Фотохимии РАН, Москва
ул. Новаторов д. 7а, корп. 1
тел: (495) 936-77-53

Персональная статистика

Всего экспериментов	
Использовано памяти	
Последние проведенные эксперименты	
Запущенные эксперименты	

Общая статистика

Всего методик	14
Всего экспериментов	1906
Всего пользователей	226
Эксперименты за сегодня	0

Пользователи "Онлайн"

- Фрактальный агрегат
- Конструирование и исследование свойств молекул
- Глобальная оптимизация

- Современный электронный образовательный ресурс
- Виртуальный лабораторный практикум по нанотехнологическим специальностям в вузах
- Интеграционная платформа для компьютерных моделей, алгоритмов и визуализаторов с веб-интерфейсом
- Интерактивная демонстрационная площадка результатов научно-исследовательских работ

Внедрения:

- Центр Фотохимии РАН
- Нано-Центр ТПУ
- Нано-Центр УрФУ
- Нано-Центр СПГГУ



Учебно-методический программный комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»

The screenshot shows the nanoModel 2.0 website. The main navigation bar includes 'Главная', 'Методы', 'Эксперименты', 'Журнал', and 'Мои документы'. The left sidebar lists various methods such as 'Организация работы с учебно-методическим программным комплексом', 'Моделирование и исследование свойств молекул', 'Конструирование и исследование свойств супрамолекул', 'Моделирование и исследование свойств наночастиц', 'Моделирование микроструктуры с помощью плотной упаковки сфер', 'Моделирование микроструктуры с помощью плотной упаковки сферополимеров', '3D реконструкция порового пространства', 'Моделирование процессов спекания', 'Моделирование самоорганизации наночастиц', 'Инициационное моделирование диффузионных процессов в мембранах', and 'Инициационное моделирование оптического отклика на сорбцию в дисперсных системах'. The main content area is titled 'Описание методики' and 'Моделирование и исследование свойств наночастиц'. It includes an 'Аннотация' (Annotation) describing the method's capabilities, a list of 'Методические материалы' (Methodological materials) with PDF links, and a 'Лабораторный практикум' (Laboratory practice) section with three sub-topics: 'Построение потенциального поля', 'Моделирование 2-компонентных наночастиц', and 'Моделирование 1-компонентных наночастиц'.

Электронные методические материалы

- Методические указания
- Описания моделей
- Описания параметров
- Презентации
- Демонстрационные данные
- Справочные данные

Описание от решения Брэгга заключается в отсутствии строго определенного выбора используемых элементарных ячеек (все кристаллические структуры описываются 14-ю решетками Брэгга). Таким образом, каждая элементарная ячейка представляет собой группу оптимально расположенных атомов с учетом координатного числа структуры, в то время как конструирование ячеек фактически является ОЦЗ, упорядоченной с учетом геометрических и физико-химических свойств используемых веществ. Для построения основной элементарной ячейки используется неэквивалентный вектор выбранного простейшего моделирования. В трехмерном случае таких неэквивалентных векторов будет три: a_1, a_2, a_3 . Следовательно, объем выбранного в качестве

элементарной ячейки параллелепипеда будет определяться следующим образом:

$$\bar{V} = \bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3) \quad (1)$$

Причем, в данном случае значение объема не будет зависеть от выбора трансляционных векторов в силу математических особенностей расчета векторного произведения.

С учетом сказанного выше особенностей используемых моделей можно составить список важных параметров:

- Координатное число;
- Число трансляционных уровней;
- Поразное номера компонентов (так как в модель интегрированы теоретические данные для каждого элемента периодической системы, то на основании поразного номера производится автоматический выбор ячеек массы и атомного радиуса элемента).

Для учета физических особенностей конструирования ячеек и взаимодействия составляющих ее атомов используются следующие атом-атомные потенциалы взаимодействия:

- в случае дальнего порядка используется потенциал Борна - Майера

$$U_{BM}(r) = A_{BM} / (Z_1 Z_2 r^2) - B / r^12 \quad (2)$$

где r - расстояние между ионами, A_{BM}, B_{BM} - постоянные, определяемые для каждой пары взаимодействующих ионов, Z_1, Z_2 - ионные (поразные) номера взаимодействующих частиц;

- в случае ближнего порядка используется потенциал Морзе

$$U_{Morse}(r) = A e^{-\beta(r-r_0)} - B e^{-2\beta(r-r_0)} \quad (3)$$

где A - глубина взаимодействия, B - жесткость связи, β - эмпирический коэффициент (в случае взаимодействий двух ионов равен 2), r_0 - минимальное расстояние взаимодействия.

В данном случае используется общее понятие о ближнем и дальнем порядке [3,4], т.е. ближний порядок это закономерность в расположении атомов и молекул повторяющаяся на расстоянии соизмеримом с расстоянием между атомами, а дальний порядок - закономерность расположения атомов и молекул на бесконечных расстояниях.

Рисунок 3 – График зависимости потенциальной энергии от расстояния между атомами

С учетом сказанного выше потенциалов взаимодействия можно составить список важных параметров влияния на потенциальную энергию системы:

- Глубина потенциальной ямы (потенциал Морзе);
- Жесткость связи (ширина потенциальной ямы потенциала Морзе);
- Атомные радиусы элементов (в прямой зависимости от узлового поразкового номера).

Таким существенным влиянием на регулируемую величину минимума потенциальной энергии будет оказано также число атомов структуры и размер конструируемой ячейки. На рис. 4 представлены примеры полученных ячеек с расчетными для них потенциальными энергиями.

Рисунок 4 – Двухмерные изображения полученных ячеек с рассчитанными значениями потенциальной энергии (a) NaCl, E = - 8.158; (b) NaCl, E = - 2.588; (c) графен, E = - 3.9944; (d) графен (2,2), E = - 9.81 нД

Реализованные модели однокомпонентных и двухкомпонентных ячеек позволяют возможность проверки данных в анализаторе 'Построение потенциального поля' для визуализации потенциального поля (рис. 5) и оценки устойчивости структуры посредством визуализации энергии потенциала.

Учебно-методический программный комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»

Параметры модели

Название эксперимента: Моделирование 2-компонентных наночастиц

Записывать видео

Параметры наночастицы

Название первого компонента: H

Название второго компонента: H

Координационное число: 6

Характерные значения координационного числа:
 КЧ=10 - AuCd, AuTi, CdMg, IrMo, IrW, MoRh, NbRh, PdTi;
 КЧ=8 - CsCl, CsBr, CsI, RbCl, AlCo, AgZn, BeCu, RuA, NiSi;
 КЧ=6 - NiAs, CoTe, CrSe, FeS, NiSn, PtB, VP, ZrTe, ZnS
 (сфалерит), AgI, AlP, BaS, CdS, CuF, GaAs, SiC;
 КЧ=4 - ZnS (ворцит), ZnO, SiC, AlN, CdSe, CuS, CuSe;
 КЧ=3 - BN, GeS, GeSe, SnS, SnSe;
 КЧ=2 - HgS, HgO.
 Данное значение задается в качестве координационного числа
 АВ соединения как для А, так и для В компонента.

Число трансляционных уровней: 3

Глубина построений наночастицы. Данный параметр в наиболее общем понимании представляет из себя число уровней со свободными позициями, которые может занять элементарная конструкционная ячейка в процессе моделирования.

Размер наночастицы, нм: 100

Радиус обрезания структуры

Параметры потенциала Морзе

Глубина потенциальной ямы, эВ: 5

Минимум потенциальной энергии в который попадают атомы наночастицы при взаимодействии

Жесткость связи потенциала Морзе, ангстрем^{-1} : 0.5

Параметр жесткость связи для парных потенциалов взаимодействия также очень часто рассматривается как ширина потенциальной ямы

Параметры радиальной функции распределения

Минимальный радиус анализа, нм: 0.01

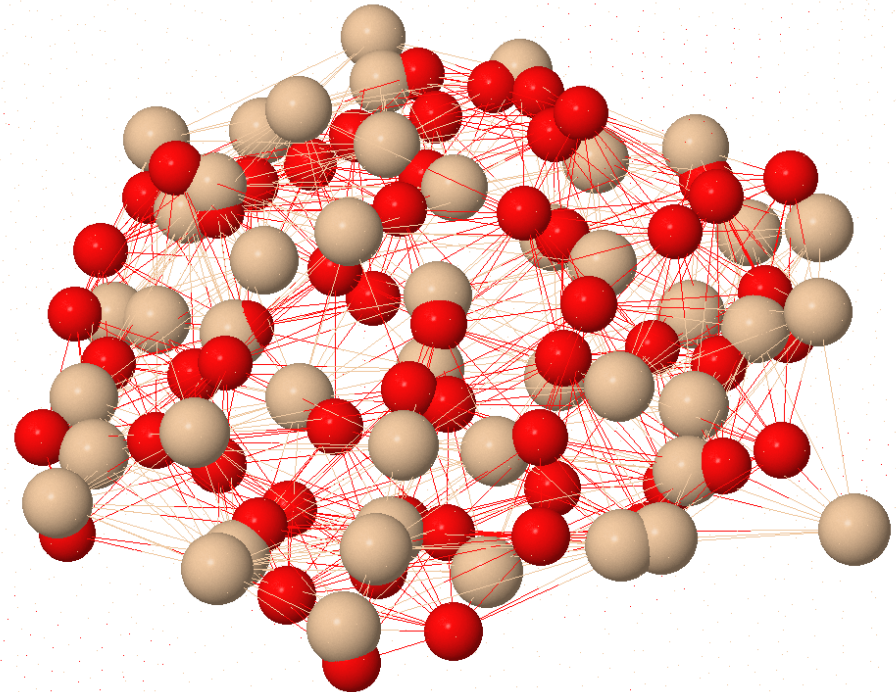
Максимальный радиус анализа, нм: 100

Шаг по радиусу анализа, нм: 0.2

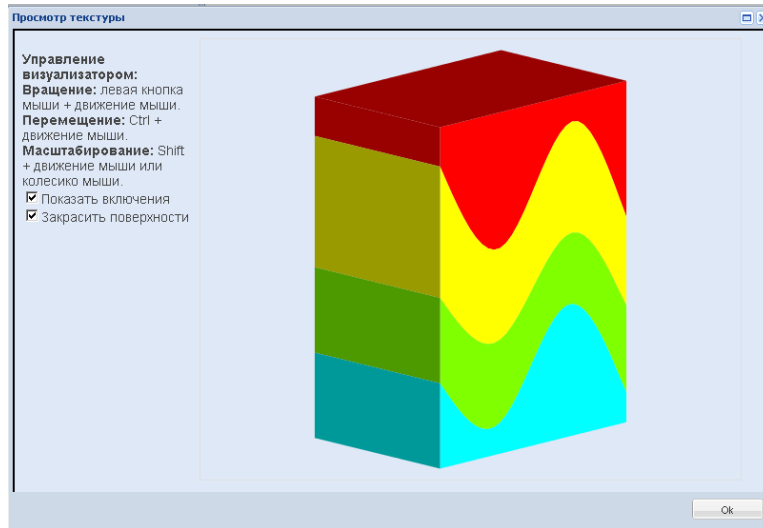
Запустить эксперимент Отменить

Запуск экспериментов онлайн

- Ввод параметров через специальную форму
- Верификация значений параметров
- Специальные редакторы параметров
- Контроль выполнения эксперимента

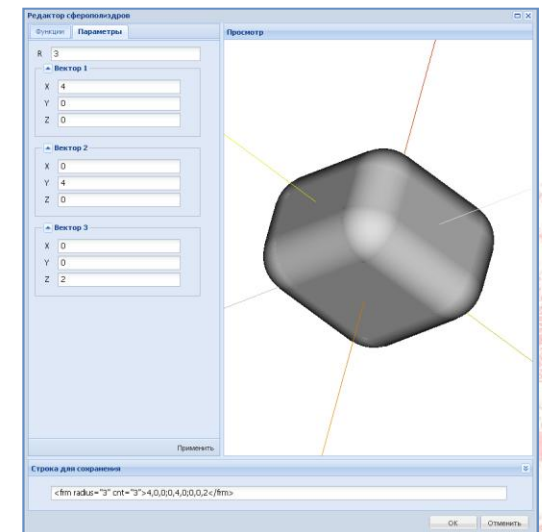
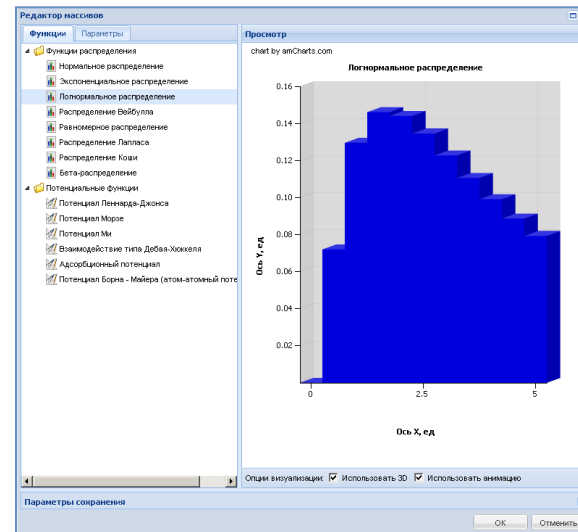
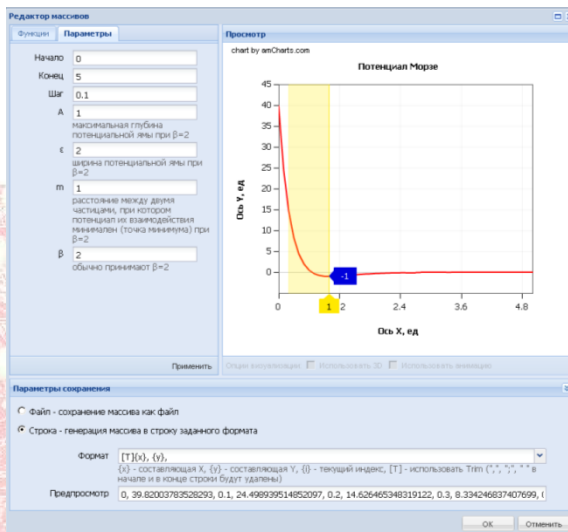


Учебно-методический программный комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»



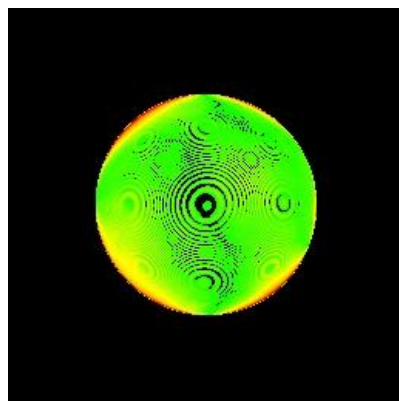
Специальные редакторы для сложных параметров моделей

- 3D Редактор слоев
- Редактор потенциальных функций
- Редактор распределений
- 3D Редактор форм частиц

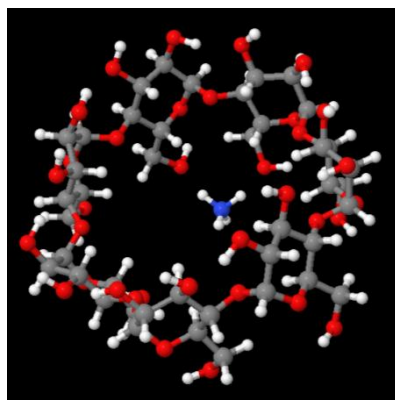


Учебно-методический программный комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»

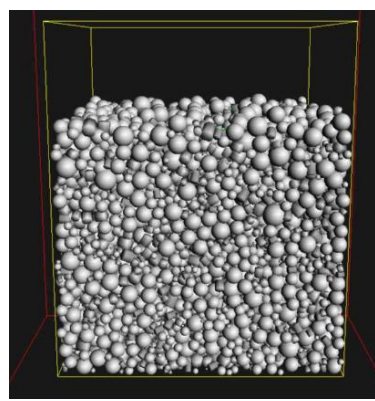
Примеры визуализации результатов моделирования



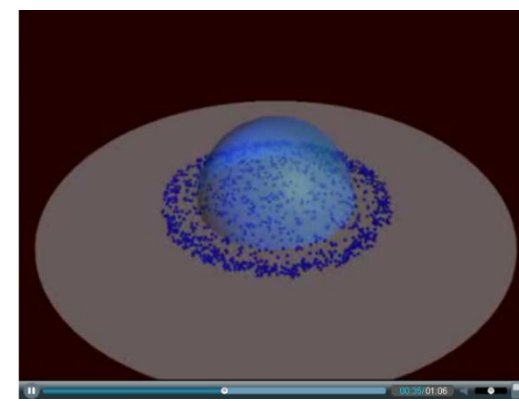
2D Визуализация
потенциального поля
наночастицы



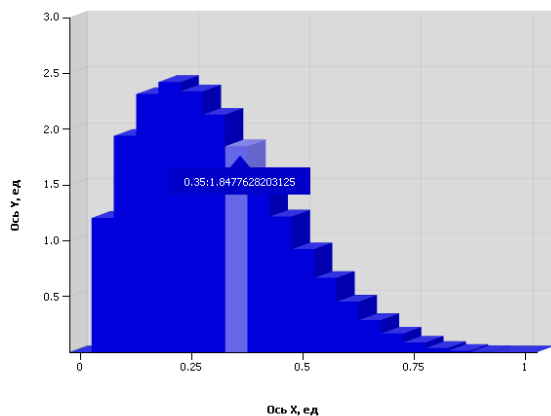
3D Визуализация
супрамолекулярного
комплекса



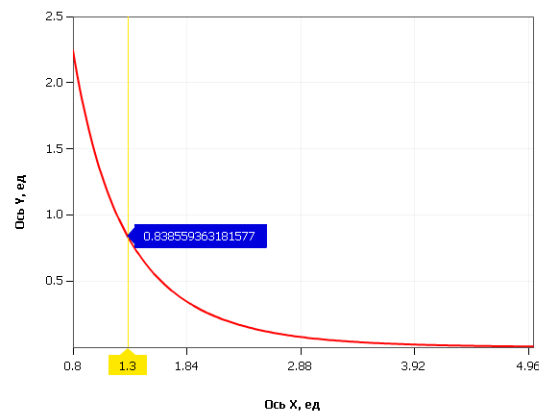
3D Визуализация
микроструктуры



Видео процесса
самоорганизации в капле



Гистограмма



График

Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях

Отчет
Моделирование процесса самоорганизации

1. Введение
Цели и задачи:
Целью проведения эксперимента является получение упорядоченных многослойных или многослойных структур посредством самосборки наночастиц и наноструктур в капле раствора.

Объекты модели:
Данная модель реализована для формирования регулярных структур, образованных ансамблем наночастиц, осаждаемых из коллоидного раствора на подложку в капле воды, что позволяет имитировать реальный процесс осаждения таких структур и изучать закономерности формирования структуры с различной морфологией. В качестве основного метода моделирования используются методы дискретных элементов, позволяющий представлять различные объекты в качестве классов с набором определенных атрибутов и функций, и проследить взаимное влияние объектов друг на друга в динамике процесса.

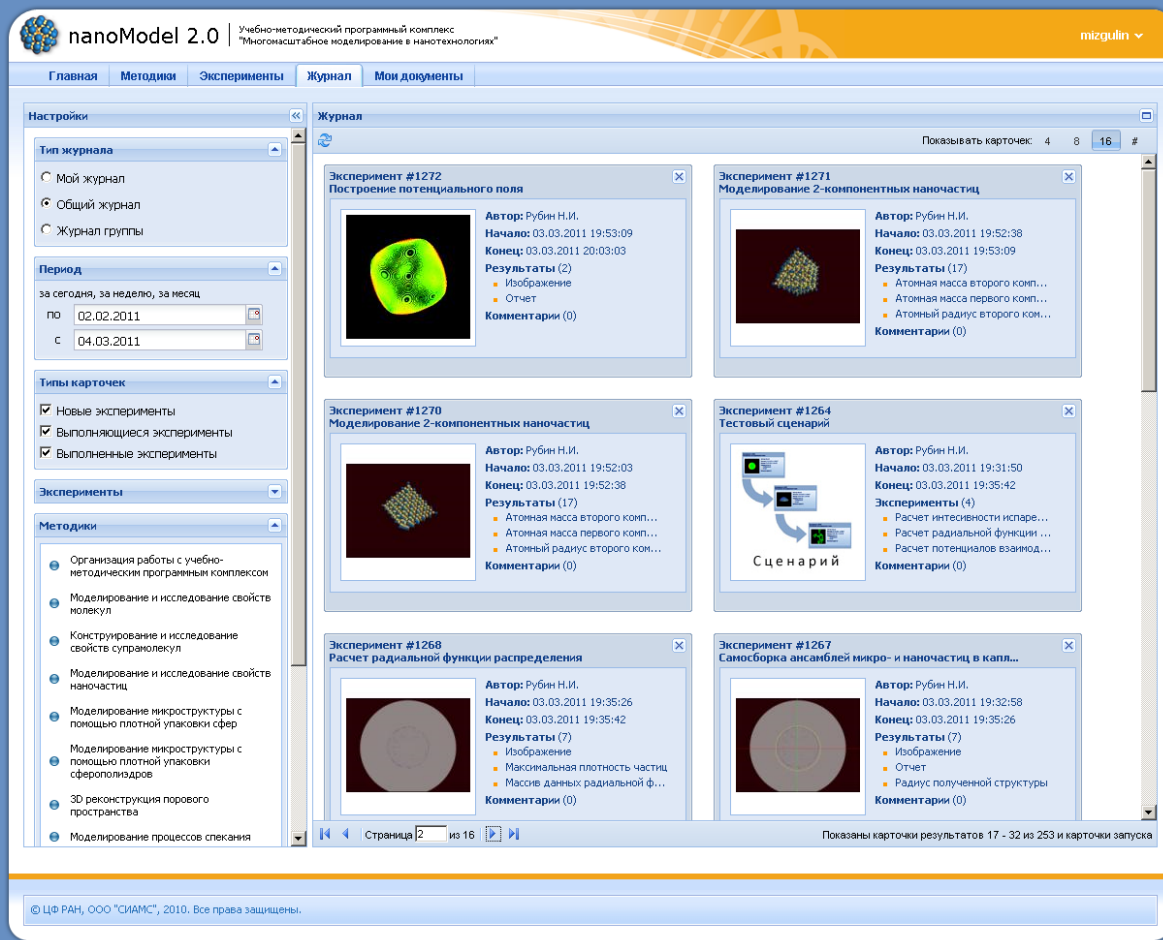
2. Результаты проведения эксперимента

Таблица 1 - Параметры проведения моделирования процесса самоорганизации

Входные параметры	
количество частиц	1000
Размер частиц, нм	1
Объем капли, фемтолитры	140000

Отчет

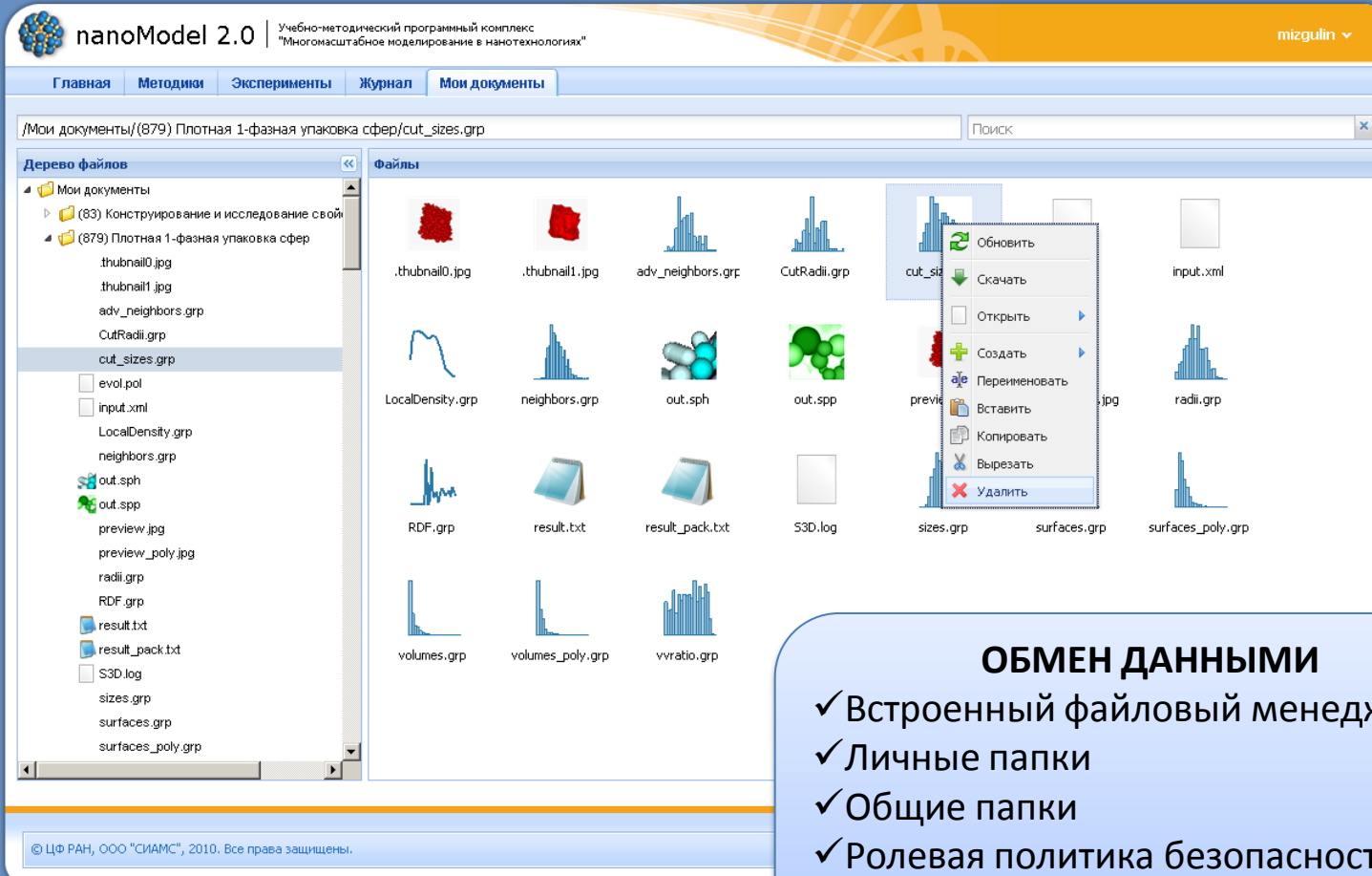
Учебно-методический программный комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»



ЖУРНАЛ

- Предпросмотр результатов в карточках экспериментов
- Журналы групп и отдельных пользователей
- Журналы методик и отдельных экспериментов
- Выбор временного периода
- Мониторинг выполняющихся экспериментов
- Разграничение доступа и управление правами

Учебно-методический программный комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»



The screenshot displays the nanoModel 2.0 software interface. At the top, there is a navigation bar with tabs for 'Главная', 'Методики', 'Эксперименты', 'Журнал', and 'Мои документы'. Below this is a search bar and a file tree on the left side. The main area shows a grid of files and folders, including thumbnails and data plots. A context menu is open over one of the files, showing options like 'Обновить', 'Скачать', 'Открыть', 'Создать', 'Переименовать', 'Вставить', 'Копировать', 'Вырезать', and 'Удалить'. At the bottom left, there is a copyright notice: '© ЦФ РАН, ООО "СИАМС", 2010. Все права защищены.'

ОБМЕН ДАННЫМИ

- ✓ Встроенный файловый менеджер
- ✓ Личные папки
- ✓ Общие папки
- ✓ Рольевая политика безопасности
- ✓ Публикация электронных методических материалов

Учебно-методический программный комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»

Компьютерный класс

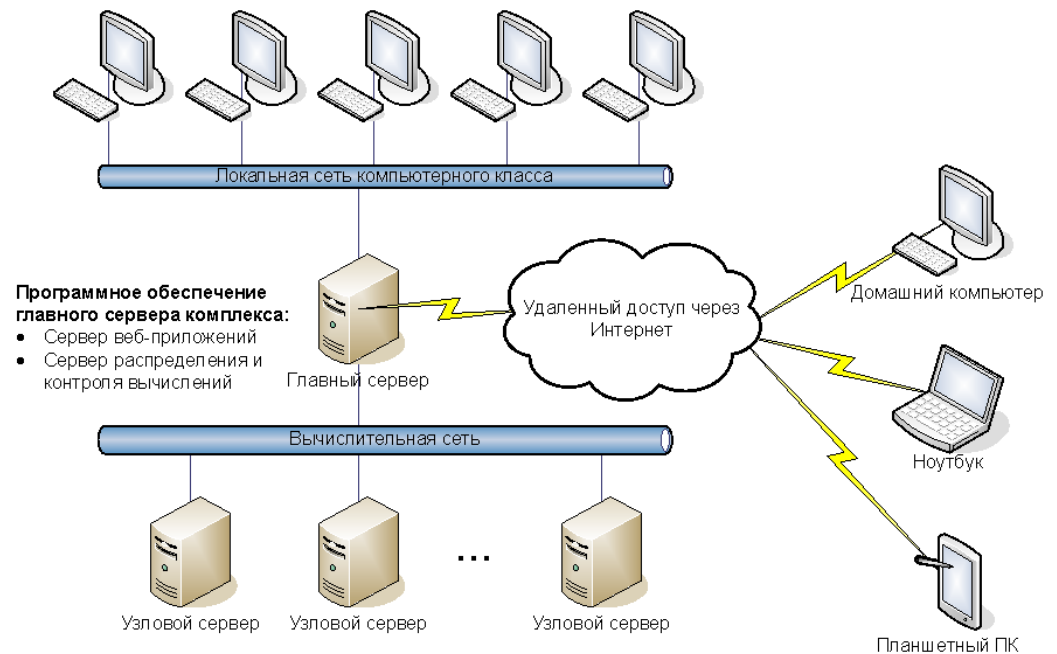


Серверная



Архитектура комплекса

- Масштабируемость
- Кроссплатформенность
- Удаленный доступ



Программное обеспечение узлового сервера комплекса:

- Блок управления узлом вычислительной сети
- Блок методик

Программное обеспечение узлового сервера комплекса:

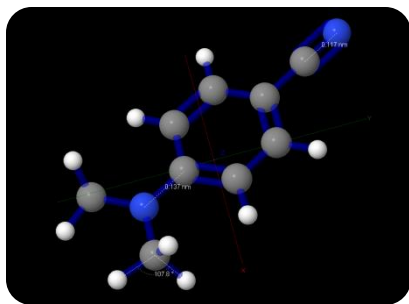
- Блок управления узлом вычислительной сети
- Блок методик

Программное обеспечение узлового сервера комплекса:

- Блок управления узлом вычислительной сети
- Блок методик

Виртуальный лабораторный практикум «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»

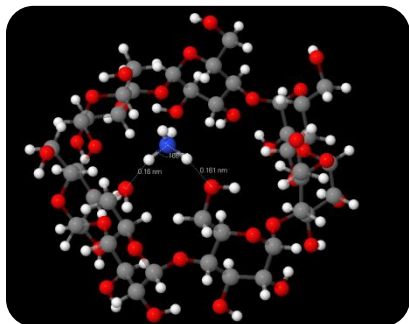
Моделирование и исследование нано- и субнано структур



МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА

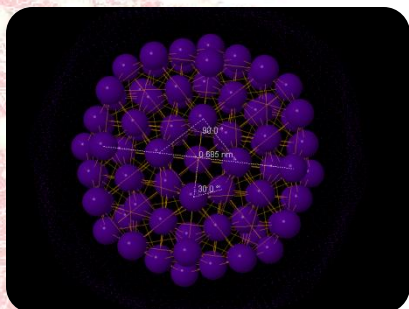
Методика предназначена для расчета энергии, геометрии и дипольного момента основного состояния молекулы диметиламинобензонитрила различными методами квантовой химии:

- метод Хартри-Фока
- метод теории возмущений второго порядка
- метод функционала плотности
- метод функционала плотности для возбужденных состояний



СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЙ КОМПЛЕКС

Методика предназначена для исследования геометрии и относительной стабильности структур супрамолекулы циклодекстрин – краситель Нильский Красный с использованием **генетического алгоритма глобальной оптимизации структуры** супрамолекулы, образованной двумя молекулами.

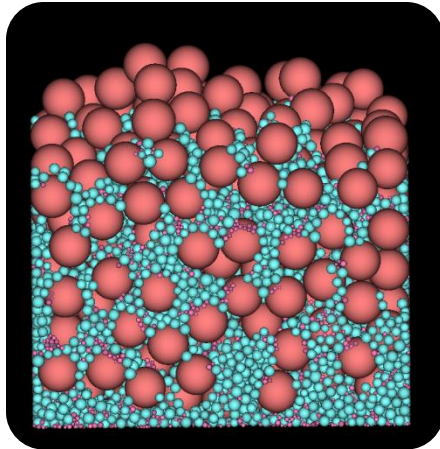


НАНОЧАСТИЦЫ

Методика позволяет моделировать однокомпонентные и двухкомпонентные наночастицы с помощью **метода дискретных элементов** и метода частиц, а также исследовать их свойства на основании геометрических и физико-химических расчетов. В рамках практической работы предлагается провести **исследование устойчивости** и оценки степени влияния внешних сил на потенциальное поле наночастицы.

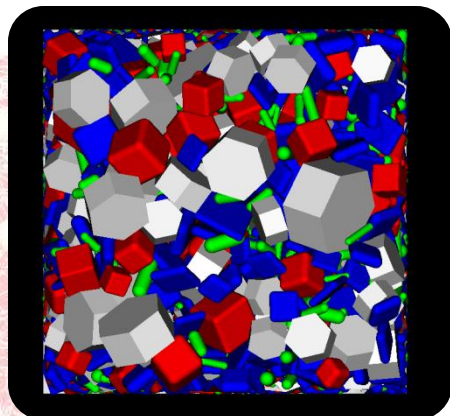
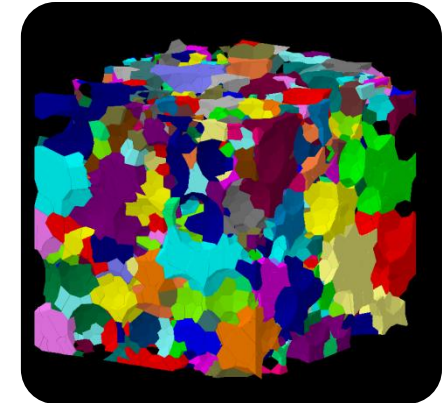
Виртуальный лабораторный практикум «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»

Моделирование и исследование свойств микроструктур



**ПЛОТНАЯ
УПАКОВКА
СФЕР**

**3D РЕКОНСТРУКЦИЯ
ПОРОВОГО
ПРОСТРАНСТВА**

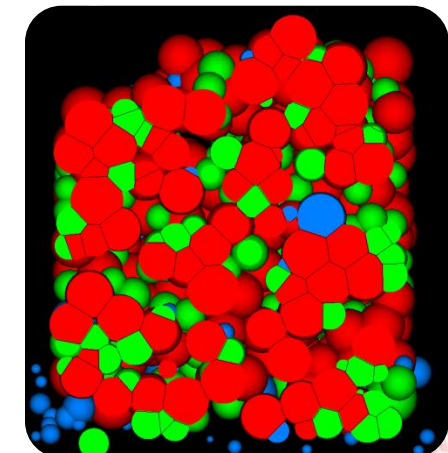


**ПЛОТНАЯ
УПАКОВКА
СФЕРОПОЛИЭДРОВ**

Темы лабораторных работ

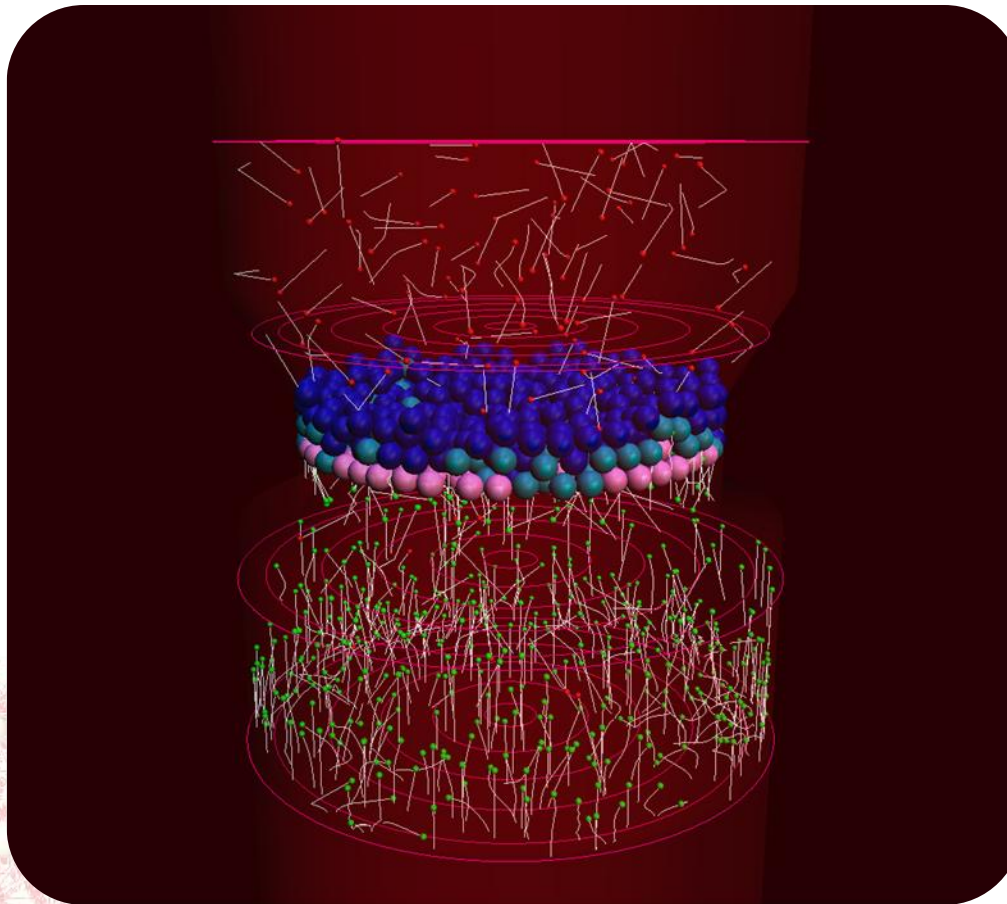
- ✓ Исследование зависимости плотности упаковки и координационного числа от параметров распределения размеров сфер
- ✓ Исследование зависимости плотности упаковки и координационного числа от геометрических параметров сферополиэдров
- ✓ Исследование характеристик анизотропии пористости от геометрических параметров сферополиэдров
- ✓ Исследование зависимости степени усадки от структурных характеристик и фазового состава упаковки сфер

**СПЕКАНИЕ
ПЛОТНОЙ
УПАКОВКИ СФЕР**



Виртуальный лабораторный практикум «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»

Имитационное моделирование диффузионных процессов в мембранах



Визуализация процесса диффузии молекулярного газа через мембрану

- Моделирование течения молекулярного газа в **кнудсеновской диффузии**
- Математическое моделирование **идеального газа**
- Исследование перепада **давления и температуры** газа до и после прохождения через мембрану в зависимости от структурных характеристик мембраны.

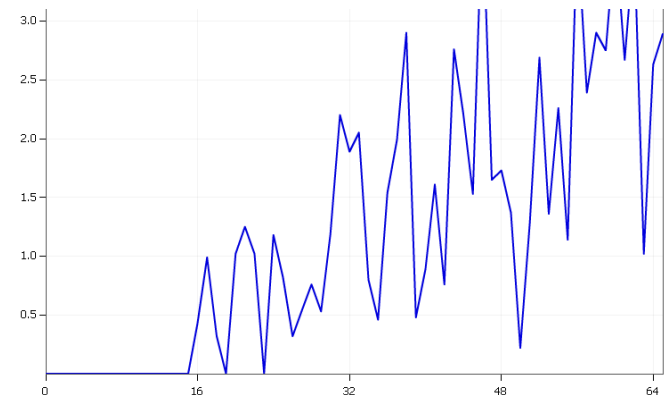
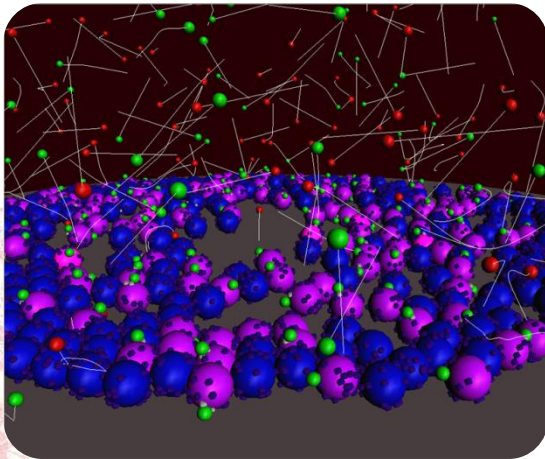
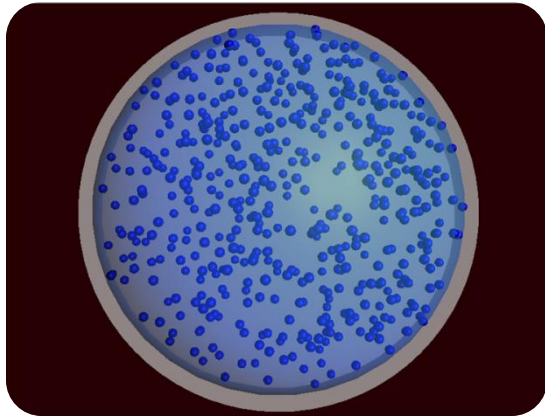


График изменения давления на нижнюю стенку экспериментальной камеры

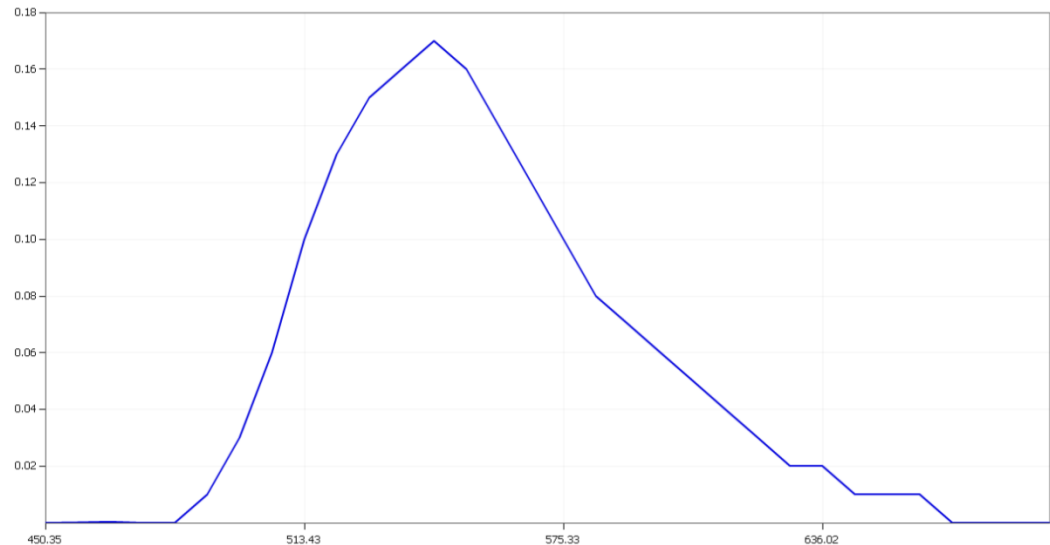
Виртуальный лабораторный практикум «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»

Виртуальное проектирование наноструктурированных материалов



Визуализация процесса
виртуального проектирования
оптического хемосенсора

- Оценка влияния концентрации летучих органических соединений на интенсивность флуоресценции сенсорного слоя
- Моделирование процесса самосборки ансамблей микро- и наночастиц в капле растворителя
- Моделирование адсорбции и диффузии газа в микропористых структурах
- Измерение оптического отклика люминофора



Моделируемый спектр флуоресценции

ВИРТУАЛЬНЫЙ ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ

На базе учебно-методического программного комплекса
«Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях»



nanoModel 2.0



Основные этапы реализации:

1. Составление технического задания на поставку комплекса
2. Поставка, монтаж и пусконаладка аппаратно-сетевое обеспечения (по запросу)
3. Удаленная поставка и пусконаладка программного обеспечения через Интернет
4. Обучение пользователей
5. Внедрение комплекса в учебный процесс
6. Развитие функционала комплекса

Комплекс разработан при поддержке Федерального агентства по науке и инновациям в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы» (ГК № 02.523.11.3014).