

УДК 53.043, 539.2

ББК В22

Рецензенты:

доктор физико-математических наук, директор института  
приоритетных технологий, ВолГУ Запороцкова Ирина Владимировна  
доктор физико-математических наук, Заместитель директора Лаборатории  
теоретической физики ОИЯИ Осипов Владимир Андреевич

Вычислительный практикум по моделированию наноструктур  
и устройств на их основе.

В учебно-методическом пособии изложено содержание лабораторных работ по изучению механических и электронных свойств наноструктур, а также дается краткое описание методов теоретического исследования. В пособии приводится подробное описание программного пакета молекулярного моделирования «Ring», с помощью которого выполняются лабораторные работы.

Пособие предназначено для студентов, обучающихся по специальности "радиофизика и электроника" и направлениям подготовки "Радиофизика" и "Конструирование и технология электронных средств", а также для повышения квалификации профессорско-преподавательского состава.

## Содержание

|  |           |
|--|-----------|
| 1. Назначение и принцип работы программного комплекса Ring .....                     | 4         |
| 1.1 Модуль NT Create.....  | 4         |
| 1.2 Команды на панели инструментов.....  | 6         |
| 1.3 Описание элементов отображения создаваемого нанокластера в графическом виде..... | 9         |
| 1.4 Модуль DataView.....   | 10        |
| 1.5. Модуль Modify.....  | 12        |
| 1.6. Модуль MD.....  | 13        |
| 1.7 Модуль KVAZAR.....   | 17        |
| 1.8 Модуль Info.....   | 18        |
| 1.9 Модуль Auto.....   | 19        |
| 1.10 Модуль DOS.....   | 21        |
| 1.11 Модуль Hani.....  | 24        |
| 1.12 Модуль OpSimm.....  | 25        |
| 1.13 Модуль Object.....  | 25        |
| 1.14 Модуль PAngle.....  | 25        |
| 1.15 Модуль NT.....  | 25        |
| <b>2. Лабораторные работы.....</b>   | <b>28</b> |
| Лабораторная работа № 1.....   | 28        |
| Лабораторная работа № 2.....   | 36        |
| Лабораторная работа № 3.....   | 44        |
| Лабораторная работа № 4.....   | 48        |