

РАСПРЕДЕЛЕННЫЙ УЧЕБНО-НАУЧНЫЙ КОМПЛЕКС В ОБЛАСТИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ

Д.М. Спельников, А.А. Гуськов, В.Г. Маслов

СПбГУ ИТМО

E-mail: pilule@ya.ru

В свете развития молекулярного моделирования в мире, и в рамках парадигмы нанотехнологий в России, актуальным является решение образовательных задач в сфере моделирования атомно-молекулярных систем и наноструктур. Моделирование наноструктур точными методами является ресурсоемкой задачей и требует серьезной ресурсной базы. Подготовка кадров в сфере моделирования в нанотехнологиях также приводит к необходимости наличия соответствующих парков компьютерной техники. Развертывание программного обеспечения, на котором осуществляется молекулярное моделирование, требует квалифицированного администрирования Unix-подобных операционных систем. Перечисленные выше причины обуславливают актуальность создания научных сервисов удаленного доступа. Задача создания и унификации образовательных программ, включающих в себя теоретические и практические аспекты моделирования, приводит к необходимости создания соответствующих обучающих порталов. Совмещение вышеуказанных объектов – обучающего интернет портала и сервиса удаленного доступа для моделирования в одно целое, является удобным решением для обучения и научных разработок.

В докладе рассматривается учебно-научный комплекс для выполнения работ в области моделирования атомно-молекулярных структур, процессов и устройств на их основе. Комплекс включает в себя набор пакетов для моделирования первопринципными и полуэмпирическими методами квантовой химии, методами динамики возбуждений путем решения уравнений движения для матрицы плотности и молекулярной динамики. Все пакеты установлены на ресурсах среды Грид ННС. Пользователь может удаленно проводить исследования интересующих его структур точными методами, такими как метод Хартри-Фока с последующим применением методов, учитывающих электронные корреляции. Может быть использован метод многокофигурационного самосогласованного поля, функционала плотности и нестационарной теории функционала плотности. Для мезосистем комплекс предоставляет полуэмпирический метод, который частично пренебрегает дифференциальным перекрыванием с последующим решением задачи конфигурационного взаимодействия. В комплексе также представлена задача моделирования течения в наноканалах методом молекулярной динамики. Комплекс выполнен на основе технологии CLAVIRE. Доступ к комплексу реализуется через специализированный портал.

Комплекс может быть применен для дистанционного обучения основам моделирования молекулярных структур. Ресурс может быть использован как вспомогательный, при подготовке кадров в соответствующей сфере и для самостоятельного ознакомления. Интернет-портал комплекса содержит теоретические курсы, посвященные квантово-химическим методам в применении к наноразмерным атомно-молекулярным системам, моделированию оптических и электрофизических свойств наноструктур методами квантовой химии, явлению оптических солитонов, компьютерному моделированию ла-

зерно-оптических систем, фотонике наноструктурных материалов, течению жидкости в наноканалах. Помимо теоретических курсов, на сайте размещены лабораторные работы, которые могут быть выполнены пользователем на разработанном комплексе удаленного доступа непосредственно с интернет-портала. Для ознакомления с практическими аспектами комплекса, пользователь может воспользоваться документацией, представленной на сайте или просмотреть электронные тьюторы – специализированные видеоролики, обучающие пользователя работе с комплексом. Для того чтобы в ходе работы или собственных исследований не возникало необходимости прибегать к использованию сторонних приложений, в комплексе предусмотрена необходимая визуализация требуемых графиков и молекулярных структур. Учебно-научный комплекс доступен членам Национальной нанотехнологической сети по адресу <http://hpc-nasis.ifmo.ru>.