



## НАНОКОМУНИКАЦИОННИ УСТРОЙСТВА И МРЕЖИ

Лекция 3.  
СИМУЛАЦИЯ НА НАНОКОМУНИКАЦИОННИ  
УСТРОЙСТВА И МРЕЖИ С РАЗЛИЧНИ ПРОГРАМИ

Доц. д-р инж. Галя Маринова  
2021 г.




### ПРОГРАМИ ЗА НАНОКОМУНИКАЦИИ Специализирани

- Nanohub
- Nanotube Modeler
- NanoEngineer - 1
- OBDCalc
- Amanogawa
- Molecular Origami
- QCAD Design
- TCAD



### ПРОГРАМИ ЗА НАНОКОМУНИКАЦИИ

С общо предназначение – приложими за  
симулации в наноконструкцията

- MATLAB
- ORCAD/PSPICE
- COMSOL Multiphysics
- CST



### Публикация

Evan J. Dawley, Dr. Mohamed Zohdy ,  
**Computer-based Tools for Nanotechnology Education  
and Research**  
Oakland University, ASEE North Central Sectional  
Conference , Pittsburgh, PA March 26 - 27, 2010



### Необходимост и изисквания към програмите за нанотехнологиите

Да подпомогнат интегрирането на различните области  
свързани с нанотехнологиите:

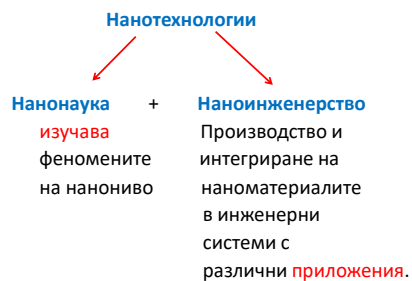
- Биология,
- Физика,
- Химия,
- Инженерство

и да подпомогнат възприемането на необходимия  
**математически апарат**

Цел – Опагледяване чрез 3D изображения и анимации  
След симулацията се генерират клипове.



### Специфика на нанотехнологиите





## Не е въпрос само на размер

На атомно ниво материалите показват нови свойства. Свойствата на материалите на нанониво не се подчиняват на **Нютоновата динамика**, а на **Квантовата физика (механика)**. Нанотехнологиите включват **проектирането и управлението на атомите**, за да изпълняват специфични **функции или да създават материали с уникални свойства**.

Необходими са програми, които позволяват:

- Визуализация (3D);
- Анимация – за да се онагледят процеса;
- Компютърни симулации.



## NANO HUB

Финансирана от Националната научна фондация на САЩ

Свободен достъп  
Достатъчна е регистрацията

[www.nano-hub.org](http://www.nano-hub.org)

Колекция от многобройни онлайн симулатори за:

- Квантова механика,
- Нано-устройства, Невронни наномрежи,
- Нано-електромеханични системи (NEMS)
- и др.



## NANO HUB (2)

Създадена е Онлайн инфраструктурата от **Мрежа за изчислителни нанотехнологии (NCN)**, която включва университети, които желаят да развият нанотехнологии, чрез иновативно сътрудничество.

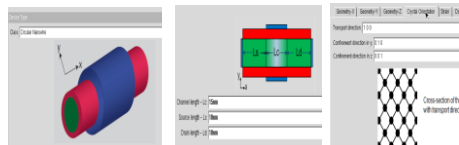
Примери:

- Квантов транзистор – **OMEN NANOWIRE**
- **NANONET** – тънки филмови транзистори на основата на мрежи от нанотръби и нановръзки
- **Neural Systems Modeling Ch10-13 Master Tool** – Моделиране на невронни системи и много други

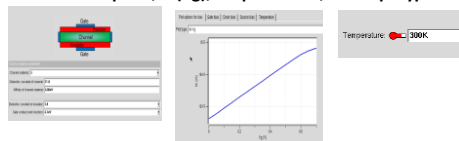


## OMEN NANOWIRE

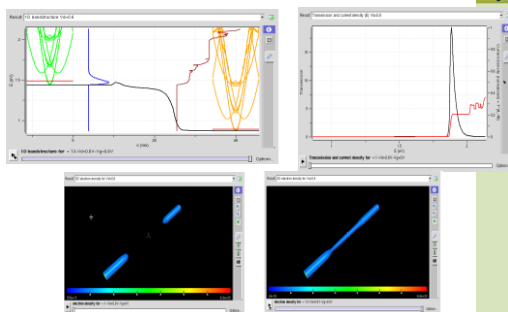
Вид на елемента, структура, ориентация на кристалите



Материал,  $I_d(V_g)$ , захранвания, температура

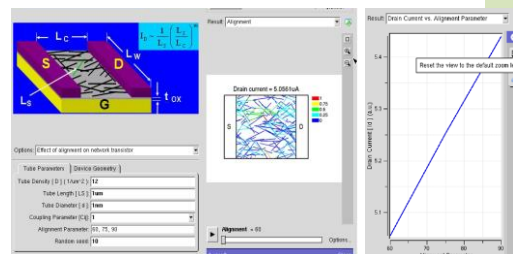


## Резултати от симулацията с OMEN NANOWIRE – графики, 3D и видоклипове



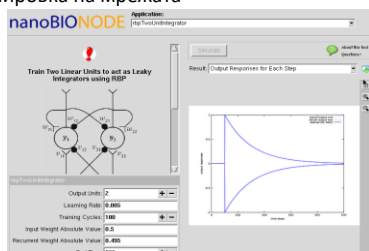
## NANONET

За тънки филмови транзистори на основата на мрежи от нанотръби и нановръзки



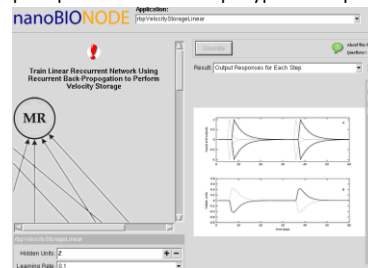
## Neural Systems Modeling Ch10-13 Master Tool

Моделиране на невронни системи от Anastasio  
Тренировка на мрежата



## Neural Systems Modeling Ch10-13 Master Tool

Тренировка на линейна рекурентна мрежа



## Nanotube Modeler

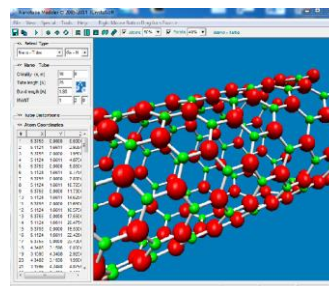
За конструиране и визуализиране на  
наноструктури – 3D:

- Нанотръби от различни атоми.
- Графен
- Наноконус
- Бъкиболи
- Фулерени
- Вируси

Базисните функции са свободни,  
**допълнителната обработка и експортирането на  
изображения** е платено.



## Nanotube Modeler



Не всички изображения могат да се копират от безплатната  
версия – например фулерените. Може само да се снимат.



## NanoEngineer-1

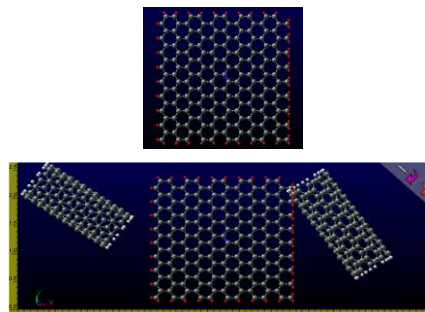
Позволява конструиране и симулация на една и  
повече структури на нанотръби, графен, ДНК и  
др.

Извежда графики за енергиите и създава  
видеоклипове след симулацията.

На свободен достъп.



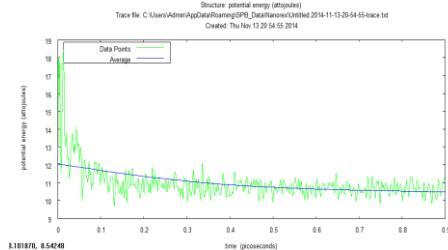
## Наноструктури в NanoEngineer-1





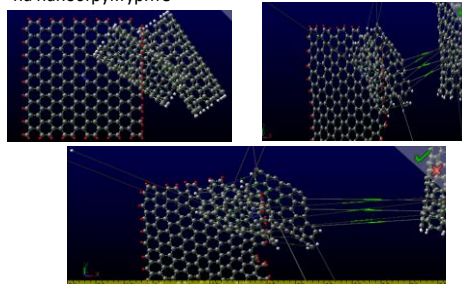
## Резултати от симулацията с NanoEngineer-1

Потенциална енергия, в [аJ]-1.10<sup>-18</sup>



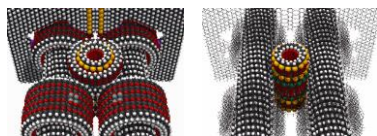
## Динамика на наноструктурите в NanoEngineer-1

Видеоклипът показва динамиката на взаимодействието на наноструктурите



## Симулация с Nano Engineering

Проектиран от К. Ерик Дрекслер, Джош Хол, Нинад Ситай и Марк Симс - 11 компонента с 25374 атома. Анимацията е получена след симулация с NanoEngineer-1 Alpha 7 и е отнела повече от 370 часа на лаптоп Dell с WindowsXP. Това е най-големия модел симулиран дотогава с NanoEngineer-1.



[http://crnano.typepad.com/crnblog/2006/08/nano\\_engineerin.html](http://crnano.typepad.com/crnblog/2006/08/nano_engineerin.html)

Симулацията отнема 2 седмици.

<http://www.zyvex.com/nanotech/images/animatedBearing.gif>



## Nanokids Nanocars



Университет Rice

Конкурси за надарени деца - строят фигурките атом по атом



## Molecular Origami

<http://wyss.harvard.edu/viewpage/m-o/interactive-feature-molecular-origami>

Програма за Синтез на биомолекули от типа ДНК

• **Molecular Origami** - интерактивен модул за конструиране на виртуални наноструктури, по ваш проект чрез кодиране на нишка ДНК. [Изисква [Flash plugin](#).]

• Молекулярното Оригами илюстрира основните принципи за изграждане на наноструктури на основата на генеричен материал. Двойките микроструктури са по аналогия на взаимнодопълващите се нуклеотиди.



## Molecular Origami(1)

Известната на всички функция на ДНК (DNA) за

• Пренос на генетичната информация на живата материя, Нова цел: ДНК като градивен материал:

• „Да се конструират“ сложни форми на ДНК – форми, които включват миниатюрни версии на звездички, триъгълници и дори иконки смайлици.

Процесът се нарича **ДНК оригами** - една дълга нишка от ДНК е програмирана така, че да се прегъва към себе си и да създава тези форми, подобно на Японското традиционно изкуство.

**Учени от института Wyss**

Приложения на конструираните форми:

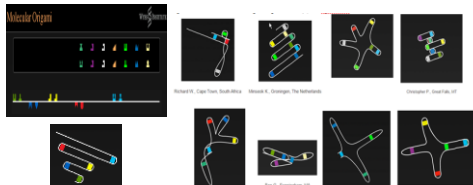
- за зъбчета в машина за производство на молекули,
- за оптични репортери за биоизображения, или
- за да доставят лекарства срещу рак, дълбоко в тялото.





## Molecular Origami (2)

Взема се дълга нишка от ДНК (наречена скеле) и се прегъва в структура по собствен проект.  
 Поддържат се с къси нишки "скоби", също направени от ДНК.  
 Всяка скоба се кодира с 2 специфични поредици:  
 • едната е част, която се намира на определено място на скелето;  
 • другата е допълнението към нея и е на друго място на скелето.  
 Когато се зададе свързване на скелето и нишките, свързването на нишките-скоби води до огъване на скелето в желаната структура.



## Amanogawa

Онлайн програма за симулация на антени



Appslet accessible from these links will be displayed in independent windows

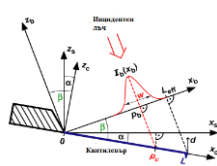
<b>NEW !!!</b>	Horizon Dipole Radiation
Single Far Field Analysis	Detailed Analysis
Linear Dipole Antenna	Detailed Analysis of Linear Antenna
Two Antenna Array	Detailed Analysis of Two Antenna Array
N-Antenna Array	



## OBDcalc

Онлайн калкулатор за определяне на чувствителността на оптична лъч в атомен микроскоп при статистически отклонен ("натоварен") и за свободно вибриращ кантилевър (конзола, пластина) в Атомен микроскоп (AFM)

► При режими на нормални вибрации от висок ред за определяне на пружинната константа на кантилевър.



<http://www.bioforce.uni-tuebingen.de/asp/OBDcalc/OBDcalc.aspx>



## OBDcalc (1)

$L = 100 \mu\text{m}$   
 $w = 20 \mu\text{m}$   
 $\rho_c = 50 \mu\text{m}$   
 $\beta = 0 \text{ deg}$

$L$  – дължина на кантилевър (конзола)  
 $w$  – диаметър на фокусираната област  
 $\rho_c$  – позиция на областта върху кантилевър  
 $\beta$  – ъгъл между кантилевърта в нормално състояние и оптичния лъч

Focused spot on cantilever (top view):

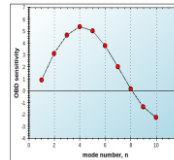
$\sigma_{xc} / \sigma_{yc} = 0.251$   
 $X = 1.08$



Натоварен лъч



Кантилевър



n	mode shape and focused spot irradiance profile	the / $\sigma_{xc}$
1		0.929
2		3.14
3		4.66
4		5.38
5		5.65
6		3.8
7		2.01
8		0.141
9		-1.33
10		-2.24



## Атомен микроскоп (AFM)

AM е с висока разделителна способност, основан на взаимодействието на сонда (тънко острие) с повърхността на изследвания образец. То се изразява в привличане или отблъскване на сондата от повърхността, дължащо се на силите на Ван дер Ваалс.  
 Чрез използването на специални остриета могат да се изучават **електрическите и магнитните свойства** на повърхностите.  
 Могат да се изследват както **проводящи**, така и **непроводящи** повърхности. Може да се измерва и релефът на образец, потопен в течност, което позволява да се работи с органични молекули, включително ДНК.

Пространствената разделителна способност на AM зависи от радиуса на кривината на острието и по вертикала достига **атомарни размери**, а по хоризонтала е значително по-голяма.

На малки разстояния между двойката атоми — един на образеца, другият на острието, при разстояние от около един ангстръм действуват **сили на отблъскване**, а на по-големите разстояния — **сили на привличане**.

Големината на силите зависи експоненциално от разстоянието между образеца и иглата.

**Отклоненията на острието** се регистрират с помощта на **чувствителни сензори** — оптични, кондензаторни или тунелни.

С устройство за разгъвка по осите X и Y, се получава сканиращ ACM.



## QCAD Design

### Симулатор Quantum Computer Aided Design

• Моделиране на многомерни квантови устройства и силициеви мулти-квантови точки (QDs) разработени за квантови битове (qubits).

**Квантовите точки (quantum dots)** - наноразмерни (1-10 nm) кристали от полупроводников материал - абсорбират и излъчват видима светлина.

Симулират се по метода на крайните елементи

• Решатели за нелинеен Поасон, ефективна маса на Шрьодингер и конфигурационно взаимодействие, с възможност за паралелна работа, самостоятелно или едновременно за 1D/2D/3D квантови устройства

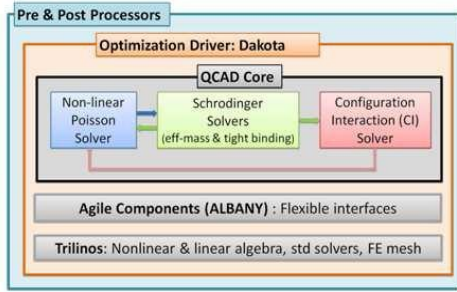
• Имам добра сходимост дори при температури близки до 1 по Келвин, което е решаващо за квантови изчислителни устройства

•Интерфейс към оптимизационната програма Dakota.

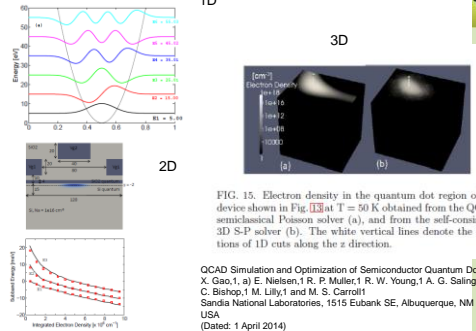




## Структура на QCAD Design



## QCAD Design- 1D,2D,3D



## MATLAB

- Високо ниво на програмиране и възможности за 3D графики и създаване на анимации на физическите феномени основани на принципите на квантовата механика.
- При симулация на системи от квантовата механика се получават голямо количество данни, свързани с броя размерности.
- Matlab е подходящ за работа с големи данни, освен това има линейна алгебра и оптимизационни функции за адекватно решаване на проблеми от квантовата механика.
- Подходящ за моделиране на мемристори и др.

NSF-funded "MATLAB on the TeraGrid,"

Musa, Sarhan M, Computational nanotechnology modeling and applications with MATLAB, 2012

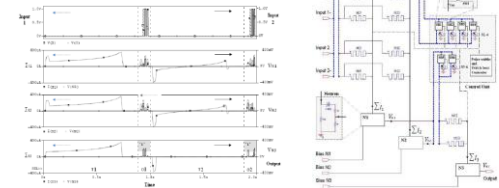


## ORCAD/PSPICE

Поведенческо моделиране на наноустройства

- Мемристори
- Мемкондензатори
- Мемробини

Симулация на схеми с мемристори - клетъчна памет реализирана с мемристори и синяси в изкуствена невронна мрежа с използване на мемристори



## COMSOL Multiphysics

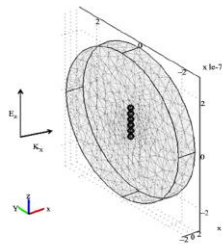
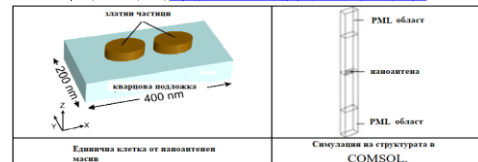


Figure 1. Sketch of the setup for the numerical calculation. COMSOL can only simulate finite elements with electric field along the chain axis [20].

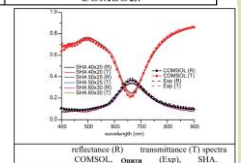


## COMSOL Multiphysics RF Module

Modeling Optical Nanoantenna Arrays with COMSOL Multiphysics Zhengtong Liu\*, Xingjie Ni, and Alexander Kildishev School of Electrical and Computer Engineering and Birck Nanotechnology Center, Purdue University, West Lafayette, IN 47907, USA, <https://www.comsol.com/paper/download/45795/liu.pdf>



спектри на отражение и пропускане на наноантената  
 SHA – Spatial harmonic analysis  
 Пространствен хармоничен анализ

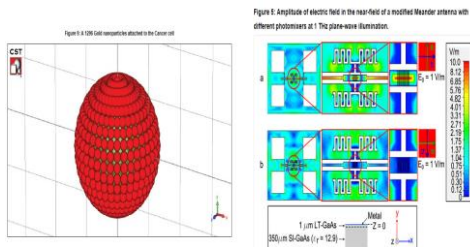




## CST Studio Suit

### 3D електромагнитен симулатор

Симулация на плазмонни наноантени с настройка на FEM мрежата  
CST Microwave studio



## SYNOPTIS TCAD

<https://www.synopsys.com/silicon/tcad.html>

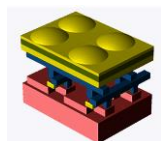
Technology Computer-Aided Design (TCAD)

Технологично моделиране от атом до схема



## SYNOPTIS TCAD

- Моделиране на атомно ниво
- Моделиране и емуляция на процеси
- Проектиране на структури
- Симулация на елементи и връзки
- TCAD-to-SPICE



БЛАГОДАРИМ  
ЗА  
ВНИМАНИЕТО!

