

## РЕФЕРАТ

Дипломна робота: 69 сторінок, 25 рисунків, 5 таблиць, 10 джерел інформації.

### ГРАФЕН, МОДЕЛЮВАННЯ НАНОСИСТЕМ, ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ.

Об'єкт дослідження – графенові площини.

Мета роботи – моделювання наноструктури графена та її обчислення за допомогою програмного додатку типу Virtual Nanolab.

Основа обчислювального експерименту – дослідження комп'ютерних моделей при різних значеннях вхідних параметрів, теоретична база моделей, що використані в даній роботі, – фізичне матеріалознавство, прикладна математика і математичне моделювання, а технічна – потужні електронні обчислювальні машини та спеціалізоване програмне забезпечення. Використання обчислювального експерименту як засобу рішення складних прикладних проблем має у разі кожного конкретного завдання свої специфічні особливості, зокрема – у випадку, коли об'єктом дослідження є наносистеми.

Актуальність роботи – комп'ютерні моделі наносистем простіше і зручніше досліджувати шляхом моделювання та проведення обчислювальних експериментів, оскільки реальні експерименти обмежені фізичними розмірами наносистем і складністю та швидкістю процесів, що відбуваються у наноматеріалах.