

**НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОСИСТЕМ**  
**НАНОЖҮЙЕЛЕРДІ КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУДІҢ КЕЙБІР АСПЕКТІЛЕРІ**  
**SOME ASPECTS OF COMPUTER SIMULATION NANOSYSTEMS**

*В.З. КРУЧЕНЕЦКИЙ, А.А. КАЛАБИНА, В.В. КРУЧЕНЕЦКИЙ*  
*V.Z. KRUCHENETSKY, A.A. KALABINA, V.V. KRUCHENETSKY*

(Алматинский технологический университет)  
(Алматы технологиялық университеті)  
(Almaty Technological University)  
E-mail: anesti-an@mail.ru

*В данной статье рассматриваются вопросы компьютерного моделирования нано-, биотехнологических систем, основные проблемы, пути их преодоления. Приводятся наиболее известные программные продукты моделирования, их виды, назначение, особенности, электронные источники. Практическое применение квантово-химических вычислительных средств к решению проблем нанотехнологии привело к естественному отбору реально работающих программ, среди которых главными являются программы, основанные на полумпирических методах квантовой химии. Прогресс в моделировании обеспечит значительное ускорение исследований практически во всех отраслях нанотехнологии.*

*Берілген мақалада нано-, биотехнологиялық жүйелерді компьютерлік модельдеудің сұрақтары, негізгі мәселелері, және оларды жеңу жолдары қарастырылады. бағдарламалық өнімдерді модельдеудің ең атақтылары, сондай-ақ олардың түрлері, белгілері, ерекшеліктері, электронды деректемелері келтірілген. Нанотехнологияның мәселесін шешу үшін квантты-химиялық есептеуіш құралын тәжірибеде пайдалану нақты жұмыс істейтін бағдарламаларды іріктеуге әкеп соқты, яғни квантты химияның жартылай эмпирикалық әдісіне негізделген басты бағдарламасы болып табылады. Модельдеудегі ілгерілік нанотехнологияның барлық саласын зерттеуді едәуір тездетуін қамтамасыз етеді.*

*In this article the questions of computer design are examined nano, biotechnological systems, basic problems, ways of their overcoming. The most well-known software products over of design, their kinds, setting, features, electronic sources, are brought. The practical value of the nanoelectronics based on the exact computer models of the quantum phenomenon allows to create yet more powerful computers, able quickly to expect the difficult nanosystems, for example, of nanorobots consisting of billions of atoms. As a result quantum processes will be able to design computers already.*

**Ключевые слова:** компьютерное молекулярное моделирование, наносистемы, квантовая химия, молекулярная механика.

**Негізгі сөздер:** компьютерлік молекулалық модельдеу, наножүйелер, кванттық химия, молекулалық механика.

**Keywords:** computer molecular modeling, nanosystems, quantum chemistry, molecular mechanics.

## ***Введение***

Компьютерное моделирование нано-, в том числе биотехнологических систем, являющихся по сути молекулярным производством, становится важным инструментом их создания. Но этот процесс сопряжен с огромными трудностями, ибо на атомарном уровне возникают сложные физические и химические явления, связанные с квантово-механическими и другими эффектами, поэтому для развития нанотехнологии особое значение приобретает разработка специальных методов моделирования наносистем. Прогресс в этой области может быть достигнут как за счет совершенствования численных методов расчета и повышения их достоверности, так и за счет разработки новых методик, основанных на других принципах расчета.

Из многочисленных источников [1] следует, что практическое применение квантово-химических вычислительных средств к решению проблем нанотехнологии привело к естественному отбору реально работающих программ, среди которых главными являются программы, основанные на полуэмпирических методах квантовой химии. В настоящее время программные пакеты квантово-химических расчетов MO PAC, CLUSTER-Z1, CLUSTER-Z2, MP-ZAVA, NANOPACK, NAN O VIB R позволяют достаточно быстро и эффективно рассчитывать большое число разнообразных наноразмерных молекулярных систем [1,2].

### ***Объекты и методы исследований***

Для создания любого нанообъекта (например, новой молекулы) нужно сначала детально разработать его структуру и технологию создания. Для того, чтобы избежать или минимизировать бесполезное конструирование многочисленных дорогостоящих прототипов наносистем используют методы компьютерного моделирования. Задача компьютерного моделирования молекулярных устройств очень сложная и трудоемкая, поскольку на молекулярном уровне перестают действовать макроскопические законы механики, используемые для расчета узлов обычных машин. Законы сопротивления материалов и гидравлики уже неприменимы - вместо этого вступают в действие законы квантовой механики, поэтому единственно приемлемыми являются методы молекулярного моделирования, успешно используемые в вычислительной химии и молекулярной биологии.

Наиболее активно применяемым подходом к молекулярному моделированию является объединение методов молекулярной механики, молекулярной динамики, а также

широко применяемого в статистической физике метода Монте-Карло. Одной из главных проблем при этом является то, что нанотехнология оперирует такими величинами, на которые законы классической физики уже не распространяются. Например, движение легких частиц (электронов) может быть описано только квантово-механическими законами. С помощью метода молекулярной механики проводится поиск энергетически выгодного пространственного строения молекулы путем нахождения локального минимума потенциальной энергии; с помощью метода молекулярной динамики вычисляется классическая траектория движения атомов путем интегрирования уравнения движения Ньютона в силовом поле молекулы, а метод Монте-Карло, с помощью которого рассматривается вся статистическая совокупность энергетически выгодных положений атомов в молекуле, позволяет определить самое выгодное в энергетическом плане пространственное строение молекул, а также оценить их термодинамические характеристики. Метод молекулярной механики применяют в основном при определении оптимальных значений параметров, описывающих молекулярное строение отдельных элементов, например, размеры углеродных трубок, а также при выявлении мест «вылавливания» нужных молекул из раствора и их связывания. Немногочисленные работы по применению метода Монте-Карло касаются моделирования процесса самосборки составных частей молекулярных устройств.

В вычислительной молекулярной нанотехнологии при выборе средств молекулярного моделирования используются квантово-химические расчеты, например, для моделирования протекания химических реакций, приводящих к синтезу составных частей молекулярных устройств. Активно используемым в молекулярной нанотехнологии вычислительным подходом является визуализация деталей молекулярных машин с помощью языка моделирования виртуальной реальности VRML. Очевидно, технология виртуальной реальности является одним из немногих способов заглянуть внутрь молекулярных машин и представить, как бы они выглядели при свете, что очень важно для человека, живущего в освещенном макром мире и привыкшего думать в его категориях (в мире молекулярных машин царит тьма, т.к. размеры их деталей намного меньше длины волны видимого света).

Активное внедрение вычислительных подходов в молекулярную нанотехнологию потребовало развития специализированного программного обеспечения. Созданы молекулярные компиляторы - программы, переводящие описание детали молекулярной машины с языка высокого уровня на атомно-молекулярный язык, воспринимаемый программами компьютерного моделирования из большого арсенала вычислительной химии. Использование молекулярных компиляторов дает возможность быстро строить молекулярные модели деталей, пригодные для обработки программами компьютерного моделирования в целях оценки их свойств. Это, в свою очередь, позволяет путем варьирования параметрами конструировать молекулярные детали, обладающие оптимальными характеристиками.

### **Результаты и их обсуждение**

Существует несколько основных типов компьютерного моделирования в нанотехнологии, из которых наиболее распространенными являются: *визуализационное, вычислительное, инженерное* [1]. Наиболее простая из современных визуализационных программ - программа *RasMol*, позволяющая наблюдать в трехмерном виде наноструктуры. С помощью этой программы можно рассмотреть наноструктуру, связи и группы химических элементов, а также перевести результаты в графический файл.

В части вычислительного моделирования построение моделей наносистем можно осуществить с помощью программы *Chem3D*, в которой учтены законы квантовой механики, молекулярной динамики и использованы различные статистические подходы. Используя эту программу, можно не только увидеть трехмерную модель нанобъекта, но и проследить его поведение при воздействии температуры, электромагнитных полей и др. Что касается инженерного моделирования, то разработан иерархический язык описания наноструктур *NanoML* (компанией NanoTitan), с помощью которого можно описать наносистему на молекулярном уровне, а также определить ее основные электрические, оптические, физические свойства, получить информацию о применении и др. Структура языка позволяет изменять модели, определять пользовательские классы, вводя новые элементы и связи, используя те же иерархические модели. При этом, модель начинается с высшей иерархической единицы - описания наноустройства. Далее она представляется отдельными наносистемами и молекулярными машинами, которые, в свою

очередь, разворачиваются в набор молекул, нанотрубок, других конструктивных элементов и взаимосвязей между ними. Для облегчения работы с языком *NanoML* имеется программа *NanoXplorer*, позволяющая создавать модели наноустройств подобно, как в программе *AutoCAD*. База данных, в которой хранятся основные блоки для молекулярных и других наносистем, постоянно обновляется. С ее помощью пользователь может применять в своей модели уже созданные готовые структуры, а создав свою структуру, сохранить ее в базе данных для общего доступа. Таким образом, база данных постоянно дополняется новыми моделями наноструктур; в ней возможен поиск модели по названию.

Программа *NanoXplorer* включает следующие модули: *NanoXplorer Display*, *Design Module*, *Database Module*, *Simulation Module* и *Assembly Module*.

- *NanoXplorer Display* - осуществляет просмотр готовых моделей наноустройств. С ее помощью можно не только увидеть наноустройство, но и определить его химические, физические, оптические свойства, возможность интеграции в более сложные системы, иерархическую структуру и т.д.;

- *Design Module* - предназначен для построения моделей наносистем с использованием иерархического описания их структур, включающего в том числе, описание отдельных молекул, составляющих наноустройство;

- *Database Module* - обеспечивает доступ в интернет-библиотеку готовых моделей. Пользователь может загрузить в эту базу данных разработанные им модели и обменяться ими с другими пользователями;

- *Simulation Module* - необходим для определения характеристик созданного наноустройства. Модуль использует набор масштабируемых инструментов, которые помогают определить физические, химические, оптические и электрические свойства модели;

- *Assembly Module* - позволяет оценить способы производства смоделированного наноустройства; при этом рассматриваются все возможные способы производства модели, включая технологии «сверху вниз» и «снизу вверх».

Особую трудность представляет компьютерное моделирование для описания поведения микроэлектромеханических систем (МЭМС), представляющих собой достаточно сложные мехатронные устройства. Для такого моделирования имеется несколько пакетов программ, которые учитывают особенности

функционирования МЭМС в широком диапазоне применения. Моделирование МЭМС проводится с использованием пакетов таких программ, как *CoventorWave*, *ANSYS*, *ABAQUS*, *CoSolve-EM* и др. Более подробное рассмотрение компьютерных средств моделирования МЭМС из-за ограниченности объема данной статьи выходит за рамки ее рассмотрения. Поэтому далее обратим основное внимание на прикладные компьютерные программы моделирования нано- и биотехнологических систем. Таких программных продуктов известно уже большое разнообразие и сведения о новых разработках появляются регулярно (практически ежемесячно). Все эти программные продукты можно классифицировать, как программы: *«расчетов из первых принципов», расчетов полуэмпирическими методами, моделирования в молекулярной динамике, интегрированные пакеты программ, программы моделирования наносистем.* Рассмотрим их кратко со ссылками для практической целесообразности на электронные источники, в которых даны более подробные сведения.

*Программы расчетов «из первых принципов»*

**ABINIT** ([www.abinit.org](http://www.abinit.org)). Пакет программ является инструментом для расчета электронного спектра, пространственной структуры и макроскопических свойств различных систем, в т.ч. больших органических молекул и наночастиц. Распространяется на некоммерческой основе.

**ADF** ([www.scm.com](http://www.scm.com)). Коммерческий пакет, состоящий из программ *ADF* (расчет на основе теории функционала плотности для молекул в газовой фазе, растворенных молекул), *BAND* (теория функционала плотности для периодических структур – кристаллов, полимеров и поверхностных слоев) и *COSMO-RS* (теплогидравлические расчеты для жидкостей).

**CFOUR** ([www.cfour.de](http://www.cfour.de)). Некоммерческий пакет программ для квантовохимических расчетов. Его главное достоинство заключается в точном расчете энергий и свойств атомов и молекул на основе теории возмущения Меллера-Плессе и метода связанных кластеров для учета корреляции электронов.

**COLUMBUS** ([www.univie.ac.at/columbus/](http://www.univie.ac.at/columbus/)). Некоммерческий комплекс программ, предназначенных главным образом для расширенных многоссылочных расчетов основных и возбужденных состояний электронной оболочки атомов и молекул.

**CRYSTAL** ([www.crystal.unito.it](http://www.crystal.unito.it)). Для моделирования молекул, кристаллов и наноструктур используется метод Хартри-Фока, теория функционала плотности и гибридные методы. Последняя версия - **CRYSTAL06** распространяется на коммерческой основе.

**DALTON** ([www.kjemi.uio.no/software/dalton/dalton.html](http://www.kjemi.uio.no/software/dalton/dalton.html)). Программа квантовохимическая для расчетов свойств молекул с помощью волновых функций SCF, MP2, MCSCF. Предназначена в основном для расчетов магнитных и зависящих от частоты электрических свойств и поверхностей потенциальной энергии молекулярных систем как в статических, так и в динамических исследованиях. Распространяется свободно.

**GAMESS** ([www.msg.ameslab.gov/GAMESS/](http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/)). Квантовохимический пакет, позволяющий проводить расчет молекулярных волновых функций методом самосогласованного поля. Основные возможности пакета: учет энергии электронной корреляции на основе теории возмущений, конфигурационного взаимодействия, связанных кластеров и функционала плотности; автоматическая оптимизация геометрии, поиск переходных состояний с использованием аналитических градиентов; вычисление молекулярных свойств, в частности дипольного момента, электростатического потенциала, электронной и спиновой плотности. Основные программные модули **GAMESS** поддерживают параллельный режим вычислений как на многопроцессорных компьютерах, так и в кластерах рабочих станций.

**GAUSSIAN** ([www.gaussian.com](http://www.gaussian.com)). Коммерческий пакет моделирования электронных структур используется для исследований в области химии и биохимии, физике и других областях, связанных с химическими процессами. Пакет *Gaussian* позволяет предсказывать энергии, молекулярные структуры и колебательные частоты молекулярных систем наряду со многими другими свойствами молекул. Широко реализованы методы учета корреляционной энергии: возможен расчет энергии и оптимизация с аналитическими градиентами для методов теории возмущений, связанных кластеров, конфигурационного взаимодействия, функционала плотности, многоконфигурационного метода самосогласованного поля. Версия пакета - *Gaussian 03* позволяет выполнять вычисления на высокопроизводительных вычислительных кластерах посредством использования пакета TCP Linda.

*JAGUAR* ([www.schrodinger.com](http://www.schrodinger.com)). Программа, входящая в коммерческий пакет *Schrodinger Suite 2008*, предназначена для быстрых расчетов электронных структур при моделировании молекулярных процессов в газовой фазе и растворенном состоянии.

*MOLPRO* ([www.molpro.net](http://www.molpro.net)). Комплекс неэмпирических квантовохимических программ поддерживает достаточно точные расчеты электронных структур на основе усовершенствованных методов учета электронной корреляции с использованием многоконфигурационных взаимодействий и связанных кластеров. Доступная версия - *MOLPRO 2008.1*.

*MPQC* ([www.mpqc.org](http://www.mpqc.org)). Свободно распространяемая квантовохимическая программа с массовым параллелизмом. Вычисляет свойства атомов и молекул с использованием стационарного уравнения Шрёдингера. Программа используется на множестве архитектур - от отдельных рабочих станций до супер-компьютеров с массовым параллелизмом.

*Q-Chem* ([www.q-chem.com](http://www.q-chem.com)). В коммерческом пакете *Q-Chem* используются усовершенствованные методы Хартри-Фока для учета электронной корреляции: расчет конфигурационных взаимодействий (CI), связанные кластеры (CC), теория возмущений Меллера-Плессе (MP). Пакет позволяет решать ши-рокий круг задач: молекулярные структуры, химические реакции, колебания молекул, ЯМР-спектры, процессы сольватации и др.

*VASP* ([cms.mpi.univie.ac.at/vasp/](http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/)). С помощью данного пакета проводят квантово-механические расчеты в области молекулярной динамики с использованием псевдопотенциалов, метода расчета электронной зонной структуры PAW и базиса плоских волн.

*WIEN2k* ([www.wien2k.at](http://www.wien2k.at)). Данный программный пакет предназначен для расчетов электронных структур в твердых телах с использованием теории функционала плотности. Расчеты основаны на методе линейаризованных присоединенных плоских волн полного потенциала (LAPW) и локальных орбиталей (LO), что является одной из наиболее точных схем для расчетов зонных структур.

*Программы полуэмпирических методов расчета.*

*AMPAC* ([www.semichem.com](http://www.semichem.com)). Распространяется на коммерческой основе. Является комплексом программ для расчета электронной структуры молекул. В версии *AMPAC9* реализованы новые полуэмпирические методы

PM6 и RM1 в дополнение к остальным: SAM1, AM1, MNDO, MNDO/d, PM3, MNDO/C and MINDO/3. Как отдельная часть в комплекс включен метод сольватации AMSOL в дополнение к модели COSMO.

*MOPAC* ([openmopac.net](http://openmopac.net)). Свободно распространяемый пакет. Применяется при расчете электронной структуры основного и возбужденных состояний атомов, молекул и твердых тел. В *MOPAC* реализованы полуэмпирические методы RM1, PM6, MNDO, AM1 и PM3. Версия пакета *MOPAC 2009* включает программу *MOZYME* для исследования электронной структуры макромолекул (белков, ДНК, полимеров и твердых тел) и позволяет рассчитывать большие (до 15 тыс. атомов) биомолекулы (в т.ч. ферменты, ДНК и т.д.).

*Программы для моделирования в молекулярной динамике.*

*AMBER* ([ambermd.org](http://ambermd.org)). Программный комплекс состоит из набора силовых полей для моделирования макромолекулярных структур (белки, нуклеиновые кислоты и ряд других классов молекул) и пакета программ квантовой и молекулярной механики (в версии *Amber 10* около 50 программ). Пакет находится в открытом доступе, но не рекомендуется для расчетов свойств материалов.

*CHARMM* ([www.charmm.org](http://www.charmm.org)). Пакет программ используется для молекулярного моделирования различных систем - от небольших молекул до сольватированных комплексов биологических макромолекул с применением различных энергетических функций и моделей - от квантовых моделей и силовых полей в молекулярной механике до полноатомных классических потенциалов.

*COSMOS* ([www.cosmos-software.de](http://www.cosmos-software.de)). Коммерческий пакет. Предназначен для компьютерного моделирования молекулярных структур, в т.ч. кристаллических, на основе гибридных силовых полей и различных методов молекулярной динамики. Пакет также используется для расчетов спектров ЯМР, включая тензоры химического сдвига. Последняя версия пакета - *COSMOS 5.0 Pro*.

*CPMD* ([www.cpmid.org](http://www.cpmid.org)). В программе *CPMD* применяется распределенная реализация теории функционалов плотности с использованием плоских волн и псевдопотенциалов для расчетов «из первых принципов» в молекулярной динамике. Для некоммерческих организаций является бесплатной.

*DLPOLY* ([www.cse.scitech.ac.uk/ccg/software/DL\\_POLY/](http://www.cse.scitech.ac.uk/ccg/software/DL_POLY/)). Пакет для модели-

рования молекулярной динамики сложных систем с проведением как последовательных, так и параллельных расчетов. В настоящее время доступны две версии: *DLPOLY2* и *DLPOLY3*. В первой версии возможны параллельные расчеты с обработкой повторяющейся информации (моделирование до 30 тыс. атомов на 100 процессорах), во второй версии параллельные расчеты могут проводиться с декомпозицией расчетных областей (расчет до 1 млн атомов с использованием от 8 до 1024 процессоров). В свободном доступе для исследовательских целей. Ограничение - возможность использования только на мощных компьютерах (суперкомпьютерах).

*GROMACS* ([www.gromacs.org](http://www.gromacs.org)). Мощный пакет программ для быстрого моделирования динамики крупных молекулярных систем (от тысяч до миллионов частиц). Предназначается главным образом для моделирования биомолекул (белки и липиды), имеющих много связанных взаимодействий между атомами. Работает в среде Linux; распространяется свободно.

*LAMMPS* ([lammmps.sandia.gov](http://lammmps.sandia.gov)). Некоммерческий пакет. Использует методы классической молекулярной динамики для моделирования и расчетов полимеров, биомолекул, твердых веществ (металлов, полупроводников и т. п.), а также крупнозернистых мезоскопических.

*MacroModel* ([www.schrodinger.com](http://www.schrodinger.com)). Коммерческий пакет предназначен для расчетов молекулярных систем на основе моделей силовых полей; используется также для исследований молекулярных конформаций, движения молекул, межмолекулярных взаимодействий, в частности в системах лиганд-рецептор.

*MOE* ([www.chemcomp.com](http://www.chemcomp.com)). Комплекс программ для моделирования молекул, в т.ч. больших биомолекул. Методы молекулярной механики и динамики разработаны в нем на основе различных силовых полей.

*NAMD* ([www.ks.uiuc.edu/Research/namd/](http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/)). Параллельная объектно-ориентированная программа для расчетов в области интерактивной молекулярной динамики, в частности для моделирования больших биомолекулярных систем, требующих значительных ресурсов. Программный код свободно распространяется для различных параллельных вычислительных платформ.

*PCModel* ([www.serenasoft.com](http://www.serenasoft.com)). Коммерческий пакет для моделирования различных молекулярных структур с использованием

силовых полей в молекулярной механике. Поддерживает многие квантовохимические программы расчетов «из первых принципов» (*ADF*, *Jaguar*, *Q-Chem*, *Turbo-mole* и др.).

*TINKER* ([dasher.wustl.edu/tinker/](http://dasher.wustl.edu/tinker/)).

Свободно распространяемый пакет программ для молекулярной механики и динамики. Доступны разнообразные инструменты для оптимизации геометрии молекул, нахождения геометрии переходных состояний. Возможно моделирование больших биологических молекул.

*Интегрированные пакеты программ*

*Chem3D* ([www.cambridgesoft.com](http://www.cambridgesoft.com)). Программа предназначена для моделирования молекулярных структур и графической визуализации молекул и белков, участвующих в химических и биологических процессах. Входит в состав коммерческого программного пакета *ChemOffice*. Обеспечивает визуализацию и просмотр молекулярных поверхностей, орбиталей, электростатических потенциалов, плотности заряда и плотности вращения.

*HyperChem* ([www.hyper.com](http://www.hyper.com)). Программный комплекс включает программы, реализующие квантовохимические методы расчета «из первых принципов» и полуэмпирические методы, а также методы моделирования в молекулярной механике и динамике. Комплекс обладает развитыми средствами визуализации, которые могут использоваться как при подготовке входной информации (структуры молекулы), так и при анализе результатов, например, рассчитанных характеристик ИК- и УФ-спектров. Основным интересом *HyperChem* может представлять для биохимиков, так как особенности реализации программы (легкость построения самых сложных молекул и кластеров, использование методов молекулярной механики и т.д.) позволяют в наглядной форме исследовать свойства биомолекул и их систем. Распространяется на коммерческой основе. Последняя версия *HyperChem 8.0*.

*NWChem*

([www.emsl.pnl.gov/docs/nwchem/nwchem.html](http://www.emsl.pnl.gov/docs/nwchem/nwchem.html)) В этом некоммерческом пакете реализовано большое количество расчетных квантомеханических методов: «из первых принципов», полуэмпирические, молекулярной механики и динамики, методы Монте-Карло. Предназначен для расчетов как на высокопроизводительных параллельных суперкомпьютерах, так и для обычных кластеров на базе рабочих станций.

*SPARTAN* ([www.wavefun.com](http://www.wavefun.com)). В программный комплекс интегрированы методы

молекулярной механики, полуэмпирические методы квантовой химии с различными моделями учета сольватационных эффектов; методы квантовой химии, теория возмущений Меллера-Плессе второго порядка. Комплекс обладает развитыми графическими средствами GUI и имеет интерфейсы с другими программами. Последняя версия — *SPARTAN 08*.

*Программы моделирования наносистем*

*Materials Studio* (accelrys.com). Программный комплекс для решения основных задач современного материаловедения. Версия 4.4 позволяет выполнять квантовомеханические расчеты и компьютерное моделирование наноматериалов. Расчеты проводятся полуэмпирическими методами, «из первых принципов», молекулярной динамики. Разработана многомасштабная гибридная технология, позволяющая объединить вычисления в области квантовой и молекулярной механики в одну расчетную схему для предсказания структурных, термодинамических и электронных свойств различных наноматериалов. Имеется интерфейс с комплексом *Gaussian*. Может применяться в самых различных областях науки и производства, включая тонкий химический синтез и создание специальных материалов, товаров бытового назначения.

*Atomistix Toolkit / Virtual NanoLab* (quantumwise.com). В пакете *Atomistix Toolkit* для моделирования различных атомных, молекулярных структур и наносистем используются квантовохимические методы моделирования, включая методы неравновесной функции Грина и теории функционала плотности, которые дают возможность детального описания электронной структуры нанообъектов. Программный пакет *Virtual NanoLab* создан на базе инструментов *Atomistix ToolKit*. В программной среде *Virtual Nanolab* объединены технологии моделирования с трехмерной визуализацией. Она предоставляет возможность моделировать различные атомные, молекулярные структуры и наносистемы, определять как их фундаментальные свойства (структуру электронных уровней, концентрацию носителей), так и важнейшие эксплуатационные свойства (электропроводность, оптические параметры и др.). Полностью интегрирована со средой *NanoLanguage*, используемой для создания на языке Python скриптов (сценариев), готовых для работы в *Atomistix ToolKit*. *NanoLanguage* является инструментом для автоматизации моделирования.

*NanoEngineer-1/NanoHive-1/NanoHive@Home* ([www.nanoengineer-1.com](http://www.nanoengineer-1.com))  
Некоммерческий пакет программ *NanoEngineer-1* позволяет проводить трехмерное многомасштабное моделирование сложных композитных структур, в т.ч. механических наноустройств и органических молекул. С помощью ряда программ, входящих в комплекс *NanoEngineer*, можно исследовать механические, химические и электрофизические свойства построенных трехмерных структур. *NanoEngineer-1* поддерживает пакеты молекулярной динамики и квантовохимические пакеты: *GROMACS*, *GAMESS*, *MPQC*. Модульная архитектура пакетов *NanoEngineer* и *NanoHive* позволяет встраивать их в другие программы или использовать совместно с ними. *NanoHive@Home* является распределенной вычислительной системой, предназначенной для моделирования крупномасштабных наносистем с привлечением сети из коммерческих компьютеров.

*SIAMS-CP Multiscale Modeling* (siams.com/products/siams\_nano/siams\_mod.htm). Система многомасштабного моделирования процессов самоорганизации и самосборки наноструктур. Реализован метод многомасштабного моделирования наносистем с иерархической системой организации, содержащих упорядоченные или неупорядоченные ансамбли элементов разных размеров и архитектур. На наноуровне проводится моделирование структуры и свойств нанообъектов с учетом межчастичного взаимодействия, на микроуровне - моделирование структуры с учетом взаимодействия крупных структур, в частности коллоидных частиц с раствором, внешними полями и т.п.; на макроуровне анализируются получаемые структуры и материалы. Программа позволяет задавать разные внутренние и внешние условия процессов самоорганизации и самосборки для получения структуры с определенными морфологическими характеристиками.

### **Заключение**

Сложность молекулярных структур требует для моделирования и расчета новых методов оптимизации при самосборке наноструктурных систем. При этом методы оптимизации должны быть согласованы друг с другом, т. е. расчетные данные должны быть представлены в определенных формах, пригодных для использования в других системах и процессах. Для этого требуется не только развитие современных интеллектуальных инфраструктур, в частности

виртуальной среды совместного решения задач (CPSE), но и создание распределенных баз данных, единого теоретического подхода и программного обеспечения.

Программное обеспечение высокого уровня должно автоматически регулировать вычислительные процессы и гарантировать оптимальный режим и точность расчетов. Для этого должны быть созданы интерфейсы, позволяющие инженерам проектировать наносистемы на компьютере, абстрагируясь от сложных аспектов квантовой механики, силовых полей, молекулярной динамики, строения наноструктур, анализа конечных элементов и т.п. Систему CPSE разумно построить, например, на основе интернет-технологий, которые обеспечивают доступность программ моделирования, подобно системе Ессе для решения задач вычислительной химии.

Прогресс в моделировании обеспечит значительное ускорение исследований практически во всех отраслях нанотехнологии. Основные усилия должны быть направлены на создание вычислительных систем параллельного типа и соответствующего программного обеспечения, поскольку только мощные ЭВМ позволят решать сложнейшие задачи моделирования в нанотехнологии.

Прогресс компьютерного моделирования наносистем сильно зависит от мощности имеющихся компьютеров и эффективности вычислительных алгоритмов, ибо чем мощнее компьютер и оптимальнее его программа, тем более сложную наносистему можно спроектировать.

Достижения нанoeлектроники, основанной на точных компьютерных моделях квантовых явлений, позволяют создать еще более мощные компьютеры, способные быстро рассчитывать сверхсложные наносистемы, например, нанороботов, состоящих из миллиардов атомов. В квантовых компьютерах квантовые процессы будут способны моделировать уже сами компьютеры.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Крученецкий В.З и др. Основы нанотехнологий. Учебное пособие (Самоучитель) / В.З Крученецкий, В.В. Крученецкий, А.А.Калабина. Алматы. 2012.-191с.: компакт-диск.
2. Крученецкий В.З, Крученецкий В.В., Калабина А.А. К основным направлениям изучения и научных исследований наноматериалов и нанотехнологий. /Ж. Вестник АГУ, №2 (92). 2013. -С. 5-11.