

УДК 001.57, 691-022.532, 004.942

СМІРНОВ Владимир Алексеевич, канд. техн. наук, доц., ведущий научный сотрудник научно-образовательного центра «Наноматериалы и нанотехнологии», Московский государственный строительный университет; Ярославское ш., 26, г. Москва, Российская Федерация, 129337, smirnov@nocnt.ru;

КОРОЛЕВ Евгений Валерьевич, д-р техн. наук, проф., директор научно-образовательного центра «Наноматериалы и нанотехнологии», Московский государственный строительный университет; Ярославское ш., 26, г. Москва, Российская Федерация, 129337, korolev@nocnt.ru;

ЕВСТИГНЕЕВ Александр Викторович, аспирант, Московский государственный строительный университет; Ярославское ш., 26, г. Москва, Российская Федерация, 129337, aspirant@nocnt.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ СРЕДСТВА ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА В НАНОТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ: ОБЗОР¹

Требованием получения строительных материалов с универсальным сочетанием свойств, обеспечивающим расширение областей их применения, обусловлен повышенный интерес к нанотехнологии строительного материаловедения. Рациональное сочетание теоретических исследований, натурального эксперимента и математического моделирования может способствовать снижению затрат времени и ресурсов при разработке наномодифицированных материалов. Методологической основой разработки композита как сложной системы должны стать положения системного анализа, диктующие, в частности, необходимость выделения критериев и последующей классификации методов моделирования. В настоящей работе критерий пространственного масштаба рассмотрен в совокупности с критериями гетерогенности и доминирующего взаимодействия в системе. Предложенная классификация стала основой для систематического анализа доступных моделей, методов и программных средств моделирования структурообразования строительных композитов. Выделены четыре пространственных уровня, соответствующие принятой классификации структурных уровней композита по критерию доминирующего взаимодействия. Для каждого из уровней – от атомно-молекулярного до уровня макроструктуры композита с крупным наполнителем – вы-

¹ Работа подготовлена при поддержке Министерства образования и науки РФ, задание 2014/107, проект 2951 «Структурообразование серных композитных материалов: феноменологические и квантовомеханические модели».

полнен анализ состояния лежащих в основе моделей структуры теоретических положений, анализ имеющихся моделей и средств численного анализа. На уровне макроструктуры, формирующейся преимущественно под влиянием гравитационных сил и внешних воздействий, для анализа сформировавшейся структуры могут применяться вероятностно-геометрические представления. Существующие модели позволяют выполнять анализ плотности упаковки и решение связанных задач протекания по каркасу и поровому пространству, в то же время соответствующие программные инструменты, пригодные для систематических исследований в нанотехнологии строительного материаловедения, в настоящее время отсутствуют. На уровне микроstructures для исследования структурообразования вместе с вероятностно-статистическими методами может быть использован метод частиц; существующие программные инструменты ограничено пригодны для численного анализа моделей микроstructures. На атомно-молекулярном уровне для исследования конфигураций и электронной плотности могут привлекаться модели и инструментальные средства квантовой химии. Определение наноструктуры строительного композита как структуры, существенное влияние на формирование которой оказывают размерные эффекты, дано в соответствии с общепринятыми определениями уровней макро- и микроstructures; для исследования наноструктуры могут применяться как методы квантовой химии, так и методы, соответствующие верхним структурным уровням.

Ключевые слова: нанотехнология, строительное материаловедение, дисперсные системы, вычислительная химия, вероятностные модели, метод частиц.

DOI:dx.doi.org/10.15828/2075-8545-2014-6-5-34-58

Методы и инструментальные средства математического моделирования, часто называемого «третьим методом познания», широко используются в различных областях науки и техники и занимают равноправное положение вместе с теоретическими исследованиями и натурным экспериментом [1, 2] по причине того, что технико-технологические решения, которые принимаются на базе анализа численных экспериментов, во многих случаях существенно сокращают затраты ресурсов, необходимых для разработки продукта.

В строительной практике на протяжении многих десятилетий численное моделирование используется на стадии проектирования и

анализа конструкций, в то время как для разработки материалов преимущественно привлекаются «традиционные» методы – натуральный эксперимент в сочетании с методами регрессионного анализа (экспериментально-статистическое моделирование). Подобное положение математического моделирования обусловлено тем, что композиционные строительные материалы представляют собой сложные системы с многоуровневой иерархической гетерогенной структурой, что осложняет построение адекватных математических моделей.

Требованием расширения ассортимента строительных материалов, обладающих уникальными сочетаниями эксплуатационных свойств [3, 4], обусловлен повышенный интерес к нанотехнологии строительного материаловедения [4]. Разработка наномодифицированных материалов, выполняемая методом проб и ошибок или же только с использованием экспериментально-статистического моделирования, в большинстве случаев приводит к недопустимым затратам времени и материальных ресурсов. По этой причине в последнее время имеется тенденция к актуализации роли моделирования в нанотехнологии строительного материаловедения.

Положительное влияние оказывает то обстоятельство, что для исследователей-материаловедов доступен большой объем теоретических и программных разработок, накопленный в смежных областях технической науки – в основном, в физике конденсированного состояния (т.н. «чистые» модели, модели «из первых принципов», разработанные на основе положений квантовой физики). Эффективность использования феноменологических моделей [5-7], для которых требуется только адекватность теории и эксперименту, но не требуется возможность исключительно теоретического построения, подтверждена многолетней практикой использования материалововедами средств регрессионного анализа при обработке эмпирических данных (экспериментально-статистическая модель, как чисто эмпирическая, является частным случаем феноменологической; для нее требуется – и должна быть строго подтверждена средствами прикладной статистики – адекватность эксперименту). Средствами регрессионного анализа, очевидно, многообразие феноменологических подходов к разработке моделей строительных композитов не исчерпывается; большинство известных в материаловедении структурных моделей (например, [7, 8]) являются феноменологическими.

Методологической основой разработки наномодифицированного строительного композита как сложной системы должны стать положения системного анализа. Исследование каждой сложной системы – это уникальная проблема, решение которой невозможно без выполнения иерархической декомпозиции на основе ключевых критериев [1, 2], число которых, вместе с числом подсистем и межсистемных связей, должно быть минимально необходимым. Для структуры строительных композитов как дисперсных систем ключевым критерием, в частности, является тип доминирующего взаимодействия или класс физико-химических эффектов, оказывающих существенное влияние на структурообразование. Смена данного критерия в целом соответствует смене масштабного уровня (хотя и не связана с масштабным уровнем причинно-следственным образом); при переходе между масштабными уровнями смена типа доминирующего взаимодействия определяет смену моделей, методов, алгоритмов и инструментальных средств моделирования. Классификация структур с использованием указанного критерия (табл. 1) является основой анализа моделей и методов моделирования в нанотехнологии строительного материаловедения. В зависимости от масштабного уровня целесообразным будет использование методов квантовой химии, метода частиц, вероятностно-статистического моделирования, а также методов, основанных на моделях сплошной среды.

Первая строка табл. 1 не соответствует точно какому-либо одному пространственному масштабу. Целесообразность включения характеристики «сплошная среда» в общую классификацию обусловлена тем, что при соответствующих целях исследования допустимо абстрагироваться от гетерогенной структуры строительного композита. Гомогенная модель строительного материала является центральным моментом при разработке методов, реализованных в промышленных пакетах численного анализа, используемых для анализа конструкций в строительстве. Для материала заранее задаются только показатели (скалярные или тензорные) макроскопических свойств – пределов прочности, модулей упругости, коэффициента Пуассона. Такая модель материала позволяет использовать весь спектр дискретных моделей (конечные разности, конечные элементы, граничные элементы, конечные объемы), разработанных в прикладной математике, для анализа напряженно-деформированного состояния, акустических, теплофизических и аэроупругих характеристик проектируемой конструкции.

Таблица 1

**Пространственные масштабы, взаимодействия и методы моделирования
в строительстве и строительном материаловедении**

Масштаб	Ключевая характеристика или тип взаимодействия	Теория и модели	Степень разработанности теории и доступность инструментальных средств
Не определен (может быть различным)	Сплошная среда	Методы механики сплошной среды: метод конечных разностей, конечных элементов, граничных элементов, конечных объемов; метод сглаженных частиц.	Детальная проработка. Доступны многочисленные верифицированные инструментальные средства, многие из них сертифицированы для использования в строительстве.
Более 0,1 мм	Гравитационные и внешние силы; макроструктура строительного композита	Плотность упаковки частиц системы и перколяционные параметры могут быть исследованы с привлечением вероятностно-геометрических методов. Известны применения модификаций метода частиц.	Детальная проработка – модели классической механики. Инструментальные средства нуждаются в разработке и/или унификации, должны быть верифицированы.
0,1... 100 мкм	Силы взаимодействия на межфазных границах; микроструктура строительного композита	Классическая механика, метод частиц. Вероятностно-геометрические методы.	Детальная проработка (модели классической механики, физической химии, термодинамики). Доступны многочисленные программные пакеты общего назначения, включающие реализацию метода частиц. Для решения задач строительного материаловедения должно быть разработано специализированное программное обеспечение.
1...100 нм	Размерные эффекты; наноструктура строительного композита	Классическая механика и метод частиц могут быть использованы только в сочетании с методами квантовой химии. Вероятностно-геометрический подход практически не используется, но его применение оправдано.	Методы и средства моделирования активно развиваются, сформулирован ряд полупирических моделей. Могут быть использованы программные инструменты общего назначения, используемые на смежных пространственных масштабах, но их применение для решения специфических задач нанотехнологии материаловедения встречает ряд трудностей.
0,1...1 нм	Атомно-молекулярный уровень	Квантовая химия.	Детальная проработка. Могут быть использованы существующие квантово-химические программные пакеты

Имеющиеся на рынке пакеты прикладного программного обеспечения, основанные на модели материала как сплошной среды, обычно включают программные инструменты для анализа целого ряда явлений, протекающих на стадии эксплуатации конструкции (т.н. «мультифизика»). В частности, пакет ANSYS [9] и программные инструменты MSC Software [10] (Nastran, Dytran, Sinda и др.), а также Abaqus [11] включают реализации расчетных методов для всех отмеченных выше областей анализа. Наиболее важно то, что эти инструменты *уже предполагают* строительный материал однородным; соответственно, они в основном непригодны на стадии разработки материала.

Два структурных уровня – микро- и макроструктура – представляют существенный интерес для строительного материаловедения. Общепринято разграничение понятий микро- и макроструктуры не на основе пространственного масштаба, а на основании типа доминирующего взаимодействия, оказывающего существенное влияние на структурообразование.

Структура строительных композиций и строительных композитов с зёрнами крупного заполнителя в основном формируется под влиянием гравитационных сил и сил, обусловленных технологическими воздействиями; этот структурный уровень принято называть макроструктурой. Структура композиций и композитов с тонкодисперсным наполнителем (возможно, как составляющих макроструктуры) формируется преимущественно под влиянием сил, обусловленных поверхностными явлениями на межфазных границах; структурный уровень принято называть микроструктурой. Пространственные масштабы, соответствующие микро- и макроструктуре, не являются точно определенными; границей между этими структурными уровнями можно считать линейный размер 10...100 мкм (определяется капиллярной постоянной системы).

Законы движения частиц на уровне макроструктуры являются законами классической механики, что, в сочетании со сравнительно простым определением перечня действующих на частицы сил, обуславливает возможность решения динамической задачи для частиц заполнителя. Нестационарная динамическая задача для макроструктуры – это задача исследования влияния технологических воздействий при изготовлении и укладке композиции. Если эта задача не представляет интереса, то допустимо ограничиться анализом установившейся

конфигурации частиц заполнителя. Соответствующая проблема – проблема исследования упаковки частиц – в материаловедении имеет как минимум вековую историю (например, [12, 13]), и может решаться как исключительно геометрическими, так и вероятностно-геометрическими методами. Результаты исследования могут быть использованы для оценки скалярных перколяционных характеристик, прогнозирования прочностных и барьерных показателей строительных материалов, оценки связанных с барьерными свойствами водо- и морозостойкости, химической стойкости.

Геометрические методы решения задачи упаковки частиц (сферических или неправильной формы, моно- или полидисперсных) являлись предметом обсуждения в многочисленных работах, что обусловлено значительным интересом к проблеме в строительном материаловедении [14–18].

Тем не менее, несмотря на интерес к проблемам плотной упаковки, задачам протекания по каркасу частиц дисперсной фазы или поровому пространству и наличию большого числа теоретических работ, необходимо констатировать отсутствие пригодных для строительной практики программных инструментов, предназначенных для численного решения обозначенных задач. Отдельные программные инструменты создаются самими исследователями-материаловедами, зачастую без привлечения накопленного багажа теоретических сведений из прикладной математики. Реализации имеют ограниченную область применения, используют взаимно несовместимые форматы обмена данными и не верифицированы должным образом. Очевидно, что подобные программные средства никоим образом не пригодны для использования в практике разработки строительных композитов, несмотря на то, что некоторые из них (например, [16, 17]) позиционируются на рынке как таковые. По всей видимости, такое положение с инструментальными средствами численного исследования макроструктуры строительных композитов продлится; известны лишь отдельные попытки унификации [7, 19].

Очевидно, что для адекватного моделирования микроструктуры строительного композита должны учитываться силы, обусловленные поверхностными эффектами (на макроуровне проявляющиеся такими явлениями, как смачивание). Силы, обусловленные внешними полями, в т.ч. силы гравитационной природы, не оказывают существенного вли-

яния на формирование микроструктуры и могут не учитываться в процессе моделирования.

Для учета влияния указанных сил модель, основанная на положениях классической механики, должна включать потенциал, представляющий силы парного взаимодействия частиц наполнителя. Производная потенциала парного взаимодействия по направлению, соединяющему центры частиц, является модулем силы парного взаимодействия, которая фигурирует в законе движения [7]. Анализ физико-химических процессов на границе раздела фаз позволяет определить параметры в выражении потенциала парного взаимодействия, после чего для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений могут быть использованы существующие программные пакеты, реализующие алгоритмы метода частиц. Доступно большое число соответствующих программных средств. Это обусловлено тем, что задача многих частиц (многих тел) впервые возникла в связи с необходимостью исследования на «противоположном» структурном уровне, при исследовании движения объектов мегамира. По этой причине к настоящему времени известны как многочисленные эффективные расчетные алгоритмы [20, 21], так и их реализации [21], использующие тот или иной вид параллелизма. Получить обширный перечень ресурсов соответствующей тематики несложно [22].

В то же время, при моделировании микроструктуры строительного композита может потребоваться введение специфических законов взаимодействия и сил парного взаимодействия, определяемых не только расстоянием между поверхностями двух частиц наполнителя. Учет подобных сил не может быть выполнен известными пакетами численного решения задачи многих частиц. Тем не менее, наличие библиотек численного анализа, доступных на условиях свободных лицензий, позволяет исследователю-материаловеду выполнить реализацию только содержательной части программного обеспечения (части, инкапсулирующей физико-химические и термодинамические сведения о системе), не обращаясь к реализации алгоритмов общего назначения.

Известны также методы, которые, являясь модификациями методов механики сплошной среды, позволяют выполнять численное исследование напряженно-деформированного состояния в микрообъемах гетерогенной многофазной системы. В частности, метод Мори–Танаки [23, 24] можно использовать для исследования напряженно-деформи-

рованного состояния в двухфазной системе при условии существенного отличия объемных долей фаз.

Последняя строка табл. 1 соответствует атомно-молекулярному уровню. Этот уровень – область, где доминируют квантовые эффекты. На данных масштабах некорректно говорить о частицах; корректные утверждения включают понятия волн и вероятности. Моделью системы является уравнение Шредингера, в стационарном случае $H\Psi = E\Psi$ весьма простое, как по форме, так и по формулировке: энергия E системы является собственным значением ее Гамильтониана H , а соответствующая этой энергии «форма электрона» (электронная орбиталь) является квадратом $\Psi\Psi^*$ собственной функции Ψ Гамильтониана (квадратом волновой функции; несущественные здесь математические детали, такие как определение квантово-механического Гамильтониана и интегрирование плотности вероятности по пространству, вполне могут быть опущены без ущерба для содержания). Но простота формы не имеет следствием простоту «решения» даже для стационарного случая; разработка методов, позволяющих для практически важных задач найти энергии и электронные конфигурации, отмечена многими Нобелевскими премиями. Методы, алгоритмы и программные пакеты квантово-механического численного анализа принято объединять единым термином «квантовая химия».

По всей видимости, наиболее известным квантово-химическим программным обеспечением является GAMESS [25]. Кодовая база этого пакета открыта и стала основой для целого ряда производных программных продуктов, в частности – отечественного пакета FireFly [26]. Методы квантово-механического анализа реализованы и во многих коммерческих программных продуктах; лидером является *Biovia* (ранее *Accelrys Materials Studio*). Общность противоположного – первой и последней строк табл. 1 – проявляется и общностью доступности, функциональности (и связанного с ней высокого порога вхождения, требующего глубокой теоретической подготовки) и даже интерфейса (командного или графического). Для того, чтобы охарактеризовать доступные материаловедам коммерческие пакеты квантовой химии, достаточно охарактеризовать любой из них.

Пакет HyperChem [27] является многофункциональным пакетом численного анализа, ориентированным преимущественно на квантово-химическое моделирование атомно-молекулярных систем. Графи-

ческий интерфейс пользователя содержит средства для дизайна таких систем (включая элементарные ячейки решеток и атомные кластеры). Реализован импорт и экспорт данных, перечень поддерживаемых форматов достаточно широк – Brookhaven PDB, ChemDraw CHM, MOPAC Z-matrix, MDL MOL, ISIS Sketch, Tripos MOL2. Пакет включает средства визуализации атомно-молекулярных структур, позволяющие акцентировать тот или иной элемент, тип химической связи или сопоставленную структурной единице векторную величину. Содержит реализацию метода функционала плотности (что, фактически, является отличительной чертой современных квантово-химических пакетов) и ряда полумпирических методов квантовой механики, а также молекулярной динамики.

Исходя из типа доминирующего взаимодействия в системе, пространственный уровень 1...100 нм уже не может быть отнесен к уровню микроструктуры. Причиной этого является размытие фундаментального для микроструктуры понятия «поверхность» – число атомов на поверхности наночастицы уже не отличается на несколько порядков от числа частиц в объеме, а на свойства системы начинают оказывать влияние ее размеры. Таким образом, между уровнем микроструктуры строительного композита и атомно-молекулярным уровнем располагается «терминологический вакуум».

Зависимость свойств от линейных размеров (размерный эффект) и является той характеристикой, которая позволяет сформулировать определение структурного уровня, на шкале масштабов расположенного между микроструктурой композита и атомно-молекулярным уровнем. *Наноструктурой строительного композита является структурный уровень проявления размерных эффектов* (очевидно, что понятия наноструктуры в целом и наноструктуры строительного композита находятся в отношении включения).

На уровне наноструктуры методы квантовой химии начинают утрачивать вычислительную пригодность – уже для моделирования атомных кластеров и молекул большинства полимеров требуются значительные вычислительные ресурсы. Тем не менее, эти методы на уровне наноструктуры успешно применяются (отчасти это обусловлено наличием эффективных численных алгоритмов). В частности, в работе [28] изложены результаты квантово-химического моделирования наномодифицированного полимерного композита, выполненного с привлечением

пакета HyperChem. Моделирование включало стадию оптимизации геометрии (поиска конфигурации с минимальной энергией) сегментов, участвующих в реакции молекул эпоксидного олигомера, отвердителя и наноразмерного компонента. Следующим этапом являлось нахождение энергий связи, численное исследование влияния наноконпонентов на олигомер и протекание реакции полиприсоединения. Сравнительный анализ найденных значений энергии связи позволил авторам [28] сделать вывод об ослаблении связи NH в присутствии ионов металлов; на основании результатов численного исследования процесса отверждения сделан вывод о самоорганизации, имеющей место в отверждаемой системе [28].

Таким образом, наноструктура строительного композита может быть исследована с привлечением средств, используемых на смежных масштабных уровнях; используемый на уровне микроструктуры метод частиц сохраняет применимость. Вероятностно-геометрическое моделирование – универсальный метод, примеры использования которого для отыскания перколяционных параметров наноструктуры также известны [29].

В заключение необходимо подчеркнуть, что, несмотря на значительный прогресс в области создания моделей, методов и программных инструментов моделирования, большинство задач, возникающих при разработке в нанотехнологии строительного материаловедения, все еще требуют решения. Системный подход к задаче, закономерно включающий теоретическое, численное и экспериментальное исследование – ключевой момент разработки новых эффективных строительных материалов.

Контакты**e-mail: info@nocnt.ru**

Библиографический список:

1. Прошин А.П., Данилов А.М., Гарькина И.А., Королев Е.В., Смирнов В.А. Синтез строительных материалов со специальными свойствами на основе системного подхода // Известия высших учебных заведений. Строительство. – 2003. – № 7. – С. 43–47.
2. Королев Е.В., Самошин А.П., Смирнов В.А., Королева О.В., Гришина А.Н. Методики и алгоритм синтеза радиационно-защитных материалов нового поколения. – Пенза: ПГУАС, 2009. – 132 с.
3. Поммершейм Дж.М., Клифтон Дж.Р. Прогнозирование срока службы бетона // Материалы и конструкции. – 1985. – Т. 18, № 1. – С. 21–30.
4. Королев Е.В. Техничко-экономическая эффективность и перспективные строительные материалы // Региональная архитектура и строительство. – 2013. – № 3. – С. 9–14.
5. Королев Е.В., Смирнов В.А., Прошин А.П., Данилов А.М. Моделирование эволюции лиофобных дисперсных систем // Известия высших учебных заведений. Строительство. – 2004. – № 8. – С. 40–46.
6. Прошин А.П., Данилов А.М., Королев Е.В., Смирнов В.А. Динамические модели при исследовании кластерообразования в композиционных материалах. Предельные системы // Известия высших учебных заведений. Строительство. – 2003. – № 3. – С. 32–38.
7. Смирнов В.А., Королев Е.В., Иноземцев А.С. Динамическое моделирование наноразмерных систем // Нанотехнологии в строительстве. – 2012. – Т. 4, № 3. – С. 26–34. – http://www.nanobuild.ru/ru_RU (дата обращения: 30.09.2014)
8. Смирнов В.А., Королев Е.В. Наномодифицированные эпоксидные композиты // Нанотехнологии в строительстве. – 2012. – Т. 4, № 4. – С. 61–68. – http://www.nanobuild.ru/ru_RU (дата обращения: 30.09.2014)
9. ANSYS. Программное обеспечение имитационного моделирования. <http://www.ansys.com/Products> (дата обращения: 30.09.2014)
10. Области применения программных инструментов MSC. <http://www.msccsoftware.com/msc-product-portfolio> (дата обращения: 30.09.2014)
11. Dassault Systems. Области применения программного обеспечения Abaqus. <http://www.3ds.com/products-services/simulia/portfolio/abaqus/abaqus-portfolio> (дата обращения: 30.09.2014)
12. Фуллер У.Б., Томсон С.Е. Подбор состава бетона. Известия Ассоциации гражданских инженеров США. – 1907. – Т. 59. – С. 67–143.
13. Фенес К.С. К моделированию потока через слой частиц твердого вещества. Бюллетень Министерства горного дела. – 1929. – 307 с.
14. Йохансен В., Андерсон П. Упаковка частиц и свойства бетона // Бетонование. – Вествилль: Ассоциация исследователей керамических материалов США. – 1991. – Ч. II. – С. 111–146.

15. *Стовэлл Т., Ларрад Ф., Бьюл М.* Линейная модель упаковки зерновых смесей // Порошковая технология. – 1986. – Т. 48. – С. 1–12.
16. *Главинд М.* Оптимизация технологии бетона. Анализ упаковки как средство разработки смеси с минимальной пустотностью // Отчет о НИР. Датский центр бетоноведения. – 1997. – 138 с.
17. *Главинд М., Педерсен Е.Й.* Моделирование упаковки при разработке состава бетона // Труды Международной конференции «Бетонные конструкции». – Шотландия, Данди, 1999. – С. 1–10.
18. *Рай Н., Патил С., Батачаржи Б.* Подбор состава бетона: метод плотной упаковки // Журнал механики и гражданского строительства. – 2014. – Т. 11, № 2. – С. 34–46.
19. *Смирнов В.А., Королев Е.В., Иноземцев С.С.* Стохастическое моделирование наноразмерных систем // Нанотехнологии в строительстве. – 2012. – Т. 4, № 1. С. – 6–14. – http://www.nanobuild.ru/ru_RU (дата обращения: 30.09.2014)
20. *Хэйл Дж.М.* Моделирование методом молекулярной динамики. – Нью-Йорк: Wiley, 1997. – 512 с.
21. *Пресс У.Г., Текульский С.А., Ветерлинг В.Т., Фланнери Б.П.* Рецепты программирования численных методов на языке С: искусство программирования в науке. – Кембридж: Изд-во Кембриджского ун-та, 1992. – 965 с.
22. Запрос поисковой системе Google «Перечень программных средств для численного решения задачи многих тел». – <https://www.google.ru/search?q=list+of+n-body+simulation+software> (дата обращения: 30.09.2014)
23. *Танака К., Мори Т.* Упрочнение кристаллов высокомолекулярными частицами и волокнами // Основания металлургии. – 1970. – Т. 18. – С. 931–941.
24. *Мори Т., Танака К.* Среднее напряжение в матрице и средняя энергия упругой деформации материалов с внедрениями // Основания металлургии. – 1973. – Т. 21. – С. 571–574.
25. Исследовательская группа Айовского государственного университета / GAMESS. – <http://www.msg.ameslab.gov/games> (дата обращения: 30.09.2014)
26. Светлячок (ранее GAMESS для ПК). Домашняя страница. – <http://classic.chem.msu.su/gran/games> (дата обращения: 30.09.2014)
27. Характеристики пакета HyperChem. URL: <http://www.hyper.com>
28. *Чашкин М.А., Кодолов В.И., Захаров А.И., Васильченко Ю.М., Вахрушина М.А., Тринеева В.В., Зайков Г.Е.* Квантово-химическое моделирование // Материалы функционального назначения: разработка, свойства, применение. – Оквилл: Эппл, 2014. – С. 344–359
29. *Смирнов В.А., Королев Е.В., Альбакасов А.И.* Размерные эффекты и топологические особенности наномодифицированных композитов // Нанотехнологии в строительстве. – 2011. – Т. 3, № 4. – С. 17–27. – http://www.nanobuild.ru/ru_RU (дата обращения: 30.09.2014)

Уважаемые коллеги!

При использовании материала данной статьи просим делать библиографическую ссылку на неё:

Смирнов В.А., Королев Е.В., Евстигнеев А.В. Моделирование и инструментальные средства численного анализа в нанотехнологии материаловедения: обзор // Нанотехнологии в строительстве. 2014. – Том 6, № 5. – С. 34–58. – URL: http://nanobuild.ru/ru_RU/ (дата обращения: _____).

Smirnov V.A., Korolev E.V., Evstigneev A.V. The review of the modeling methods and numerical analysis software for nanotechnology in material science. Nanotehnologii v stroitel'stve = Nanotechnologies in Construction. 2014, Vol. 6, no. 5, pp. 34–58. Available at: http://nanobuild.ru/en_EN/ (Accessed _____). (In Russian).