

Особенности математического моделирования в задачах проектирования наносистем

Л.А. Зинченко, В.А. Шахнов

Аннотация. Переход от фундаментальных исследований наносистем к их инженерному применению требует разработки новых подходов к математическому моделированию наносистем. В статье рассматриваются особенности математического моделирования при решении задач проектирования наносистем. Показано, что в задачах проектирования некоторых классов наносистем возможно использование упрощенных моделей.

Ключевые слова: моделирование, наноинженерия, проектирование, наносистемы.

Введение

Наносистемы находят все большее применение в различных прикладных отраслях, в первую очередь в автомобильной электронике, телекоммуникационных системах, биомедицинских системах и т.д. [1-4]. В общем случае под наносистемой понимается материальный объект, являющийся функционально целым, детерминистически достоверным и логически понятным и состоящий из ограниченного числа атомов или молекул, комбинация которых обеспечивает возникновение у объекта новых свойств, проявляющихся в виде квантово-размерных, синергетически-кооперативных эффектов и других явлений и процессов, связанных с проявлением наномасштабных явлений [4-8]. Исследования наносистем тесно связаны с исследованиями в физике, химии и биологии, в частности, в квантовой теории, описывающей возможные варианты поведения и взаимодействия элементов наноструктур в нанометровом диапазоне, в физическом; материаловедении, в особенности в разделе, изучающем свойства наноматериалов; в химическом синтезе, биохимии и молекулярной биологии, описывающих объекты биологиче-

ского происхождения и химические процессы синтеза наноструктур и протекающие в самих наноструктурах [4].

Переход от фундаментальных исследований наносистем к их инженерному применению требует разработки новых методов проектирования систем с заданными свойствами, учитывающих особенности наноразмерных объектов [4, 9, 10].

В общем случае решение задачи синтеза системы с заданными свойствами базируется на исследовании проектного пространства и нахождении совокупности альтернативных решений, характеристики которых удовлетворяют заданным ограничениям. При проектировании сложных систем характерно наличие неполноты исходных данных [11, 14], и эти проблемы существенно усложняются при проектировании наносистем [9, 15].

Необходимость учета различных явлений в наноструктурах приводит к тому, что проектирование наносистем возможно только на основе многодисциплинарного и междисциплинарного подходов, позволяющих адекватно оценить разнообразные характеристики наносистем: тепловые, механические и т.д. Однако использование многодисциплинарного и междисципли-

нарного подходов приводит к значительному усложнению маршрутов проектирования наносистем. Среди основных проблем необходимо отметить многомерность, сильную нелокальную нелинейность, большое число неизвестных величин и функций.

Выбор адекватной модели наносистемы является нетривиальной задачей даже в простейших случаях. Использование точных моделей наносистем [16] приводит к недопустимо большим вычислительным затратам при их проектировании. Использование упрощенных моделей может привести к нахождению неэффективных или даже некорректных проектных решений.

В данной статье обсуждаются некоторые подходы, позволяющие учесть особенности наносистем при выборе маршрутов их проектирования. Авторы не ставят перед собой задачу охватить все аспекты особенностей решения задач синтеза наносистем. Основное внимание уделяется одному из ключевых моментов в проектировании наносистем – выбору модели, адекватно отражающей поведение исследуемой наносистемы и позволяющей выполнить проектирование системы с заданными свойствами. Обсуждаются также вопросы достоверности выбранной модели с точки зрения возможностей применения в инженерной практике.

1. Особенности моделирования наносистем

При оценке различных альтернативных проектных решений традиционно используются три подхода:

- теоретический анализ;
- экспериментальные исследования;
- моделирование.

Однако при проектировании наносистем первые два подхода связаны со значительными трудностями.

Математический аппарат, используемый при теоретическом анализе наносистем [15], является весьма сложным, что приводит к практической невозможности выполнить инженерные расчеты за приемлемое время.

Современные методы микроскопии (сканирующей туннельной микроскопии, бесконтактной атомно-силовой микроскопии и т.д.) позво-

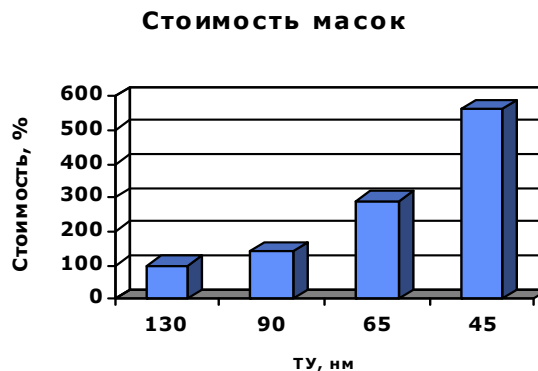


Рис. 1. Сравнительная характеристика стоимости изготовления масок для различных технологических узлов (ТУ)

ляют исследовать различные наноматериалы. Однако экспериментальные исследования, которые были в течение многих десятилетий одним из важнейших инструментов в инженерной деятельности, оказываются весьма дорогостоящими при проектировании наносистем. В качестве примера, прямо или косвенно подтверждающего это, можно привести рост стоимости изготовления масок при переходе к различным технологическим узлам, показанный на Рис. 1 в [9]. Видно, что при переходе к проектным нормам от 130 к 45 нм стоимость изготовления масок увеличивается более чем в 5 раз.

Таким образом, моделирование оказывается зачастую наиболее доступным и экономически выгодным инструментом проектирования наносистем. Оно позволяет исследовать различные варианты наносистем без их физической реализации. Однако в связи с уменьшением роли этапов теоретического анализа и экспериментальных исследований к этапу моделирования наносистем предъявляются повышенные требования.

К отличительным чертам моделирования наносистем необходимо отнести необходимость в общем случае использовать модели всех уровней иерархии, включая:

- классические модели;
- полуклассические модели;
- модели, основанные на квантомеханических подходах.

Классические модели традиционно применяются в промышленных САПР. Они позволяют выполнить моделирование систем с малыми

вычислительными затратами по сравнению с подходами, основанными на полуклассических и квантомеханических моделях. Однако при моделировании наносистем классические модели показывают низкую точность результатов моделирования.

Модели, основанные на квантомеханических подходах, практически не использовались в инженерной практике до настоящего времени, несмотря на точность применяемого аппарата описания физических явлений. Это объясняется большими вычислительными затратами при работе с моделями этого уровня иерархии. Более подробно особенности квантомеханических моделей будут рассмотрены ниже.

В последние годы основное внимание инженеров было сосредоточено на использовании полуклассических моделей. Это объясняется тем, что модели этого уровня иерархии обеспечивали приемлемый компромисс между вычислительными затратами и точностью описания

физических явлений с точки зрения применения в инженерной практике.

Существующее множество полуклассических моделей наносистем может быть систематизировано так, как представлено на Рис. 2. Поясним приведенные на Рис. 2 данные.

Диффузионно-дрейфовые модели широко используются для моделирования устройств с линейными размерами не менее 0,5 мкм [14]. Они требуют минимальных вычислительных затрат по сравнению с другими классами моделей наносистем. Однако ограниченность этих моделей, связанная с предположением о линейной локальной зависимости, приводит к необходимости применения более точных моделей.

Гидродинамические модели могут использоваться при моделировании устройств с линейными размерами не менее 0,1 мкм. Они занимают промежуточное место в группе полуклассических моделей, обеспечивая компромисс между вычислительными затратами и

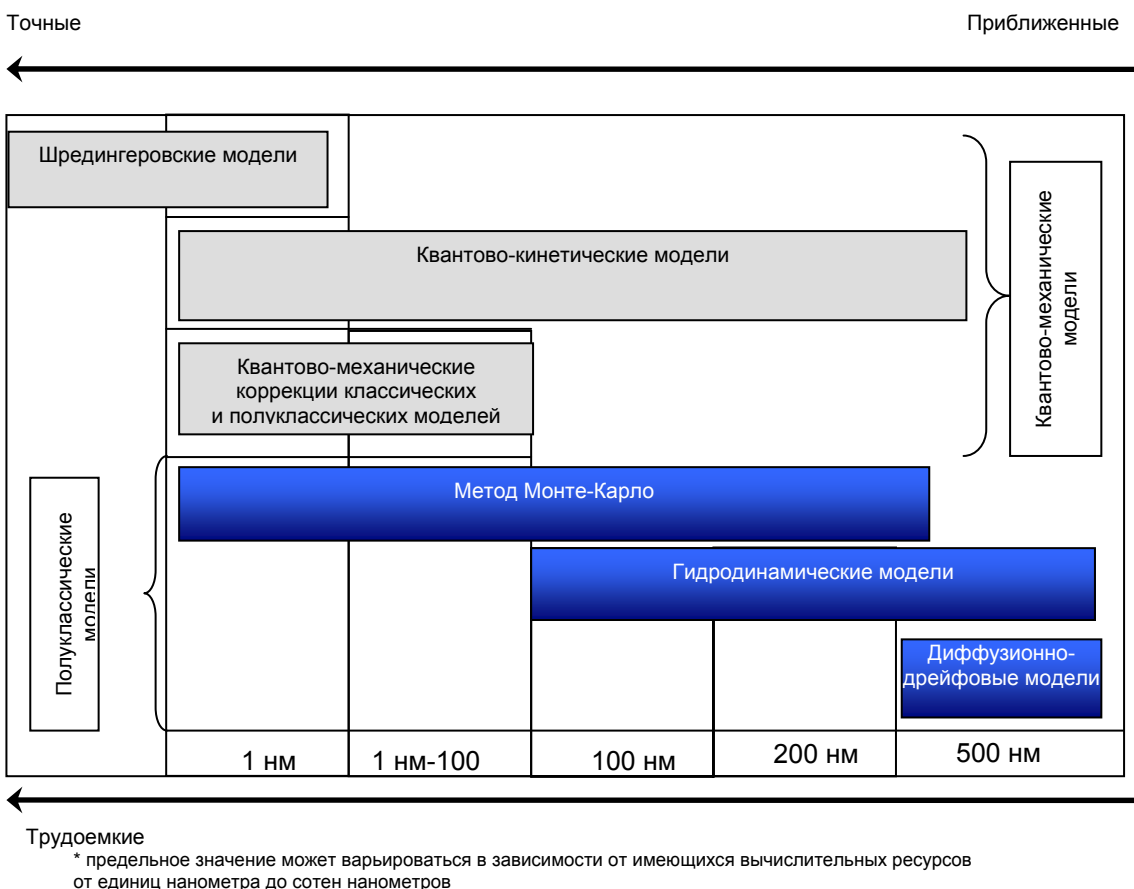


Рис. 2. Классификация полуклассических и квантово-механических моделей

точностью по сравнению с остальными моделями, входящими в группу полуклассических моделей. Однако аппроксимации, принятые в этих моделях, не позволяют корректно описать свойства наноструктур.

В связи с этим перспективным представляется метод Монте Карло (Рис. 2). Для упрощения расчетов используются ряд приближений, в частности, метод классической молекулярной динамики. Этот подход был успешно применен для описания наноструктур с линейными размерами свыше 1 нм [17]. К недостаткам этого подхода следует отнести значительную трудоемкость моделирования по сравнению с остальными моделями, входящими в группу полуклассических моделей.

В настоящее время существует различное программное обеспечение [18-28], позволяющее выполнить моделирование с применением полуклассических моделей. В Табл. 1 представлены название, разработчик и используемый подход в различных пакетах программ моделирования [18-28].

Несмотря на преимущества полуклассических моделей, при описании наноструктур с линейными размерами порядка нанометра необходимо использовать модели, основанные на принципах квантовой механики.

С точки зрения обеспечения корректности моделирования наносистем наилучшими являются модели, базирующиеся на использовании уравнения Шредингера. Однако очень большое число переменных, приводящее к значительным вычислительным затратам, сдерживают применение этого подхода в нанотехнологии. Тем не менее, единственным подходом для моделирования наноструктур с линейными размерами менее 1 нм является применение шредингеровских моделей (Рис. 2)

На основе квантово-кинетических моделей (квантомеханической версии уравнения Лиувилля, кинетического уравнения Больцмана) можно получить более простые по сравнению со шредингеровскими модели. К их преимуществам следует отнести также достаточно большой диапазон линейных размеров наноструктур, при которых квантово-кинетические модели применимы. Однако их точность оказывается допустимой только при моделировании разреженных систем.

Табл. 1.

№	Название	Используемые подходы	Разработчик
1	BAMBI	Диффузионно-дрейфовые модели (2D)	Технический университет Вены
2	BIPOLE	Диффузионно-дрейфовые модели (2D)	Университет Ватерлоо
3	CADDETH	Диффузионно-дрейфовые модели (3D)	Hitachi Ltd
4	CURRY	Диффузионно-дрейфовые модели (2D)	Philips
5	FIELDAY	Диффузионно-дрейфовые модели (1D, 2D и 3D)	IBM
6	HFIELDS	Диффузионно-дрейфовые модели (2D)	Университет Болоньи
7	HyperChem	Методы классической молекулярной динамики	Hypercube, Inc
8	LUSTRE	Диффузионно-дрейфовые модели (1D)	Корнелльский университет
9	MINIMOS	Диффузионно-дрейфовые модели с подключаемым модулем Монте-Карло (2D и 3D)	Технический университет Вены
10	NWChem	Методы классической молекулярной динамики	Северо-западная тихоокеанская национальная лаборатория Министерства энергетики США
11	PADRE	Диффузионно-дрейфовые модели (2D и 3D)	AT&T
12	PISCES	Диффузионно-дрейфовые модели (2D)	Стэнфордский университет
13	SEDAN	Диффузионно-дрейфовые модели (1D)	Стэнфордский университет
14	SCHRED	Диффузионно-дрейфовые модели (1D)	Университеты США
15	TINKER	Методы классической молекулярной динамики	Вашингтонский университет

Модификации классических и полуклассических методов с учетом квантомеханической коррекции являются наиболее простым подходом, позволяющим учесть особенности наноструктур при разумных вычислительных затратах. Однако к недостаткам этого подхода следует отнести относительно невысокую точность моделирования по сравнению с другими моделями, входящими в группу квантомеханических моделей.

Табл. 2.

№	Название	Используемые подходы	Разработчик
1	APSYS	Диффузионно-дрейфовые модели с квантомеханической коррекцией (1D)	Crosslight Software
2	ATLAS	Диффузионно-дрейфовые модели (2D и 3D) с квантомеханической коррекцией	Silvaco
3	NEMO	Решение стационарного уравнения Шредингера (1D и 3D)	Raytheon
4	NWChem	Модели молекулярной динамики на первых принципах	Северо-западная тихоокеанская национальная лаборатория Министерства энергетики США
5	PC GAMESS	Модели молекулярной динамики на первых принципах	МГУ
6	QWalk	Решение уравнений Шредингера на основе квантового метода Монте-Карло	Университет Северной Каролины
7	SCHRED	Диффузионно-дрейфовые модели (1D) с квантомеханической коррекцией	Университеты США
8	Sentaurus Device	Классические модели с квантомеханической коррекцией	Synopsys
9	VASP	Модели молекулярной динамики на первых принципах	Университет Вены

В настоящее время существует различное программное обеспечение [19-32], позволяющее выполнить моделирование с помощью моделей, основанных на квантовой механике. В Табл. 2 представлена краткая информация о некоторых пакетах [19-32].

Из данных Табл. 2 можно сделать вывод, что использование модификаций классических методов с учетом квантомеханической коррекции становится в последние годы промышленным стандартом. Остальные подходы пока находятся в стадии исследований.

Одним из факторов, сдерживающим применение шредингеровских моделей для общего случая, являются большие вычислительные затраты. Это объясняется тем, что в наносистемах отсутствует дальний порядок, который позволяет уменьшить число независимых степеней свободы системы. На Рис. 3 представлена экспериментальная зависимость увеличения вычислительных затрат K решения уравнения

Шредингера при увеличении общих линейных размеров наносистемы. Экспоненциальный характер зависимости показывает ограниченность возможностей применения шредингеровских моделей в инженерной практике.

Для преодоления этого возможны различные подходы. Так, использование высокопроизводительных вычислительных систем позволяет уменьшить вычислительные затраты при моделировании наносистем на базе шредингеровских моделей с нескольких дней до нескольких минут [33, 34].

Другим подходом является многомасштабное моделирование.

Однако при переходе от одного иерархического уровня моделирования к другому необходимо использовать различные характеристики системы. Описание моделируемого объекта с помощью шредингеровских моделей строится на языке волновых функций. При переходе на более высокий уровень иерархии, например, классической молекулярной динамики, атомы уже рассматриваются как классические частицы. При переходе к макроскопическому уровню существенны не только средние значения характеристик системы, но и их отклонения. Использование разнообразных моделей позволяет учесть особенности наноразмерных систем на всех уровнях проектирования. В связи с вышеизложенным при моделировании наносистем приобретают важное значение программные комплексы, обеспечивающие многомасштабное моделирование. Из перечисленных в таблицах 1 и 2 программных комплексов только пакет NWChem поддерживает возможность многомасштабного моделирования на основе полу-

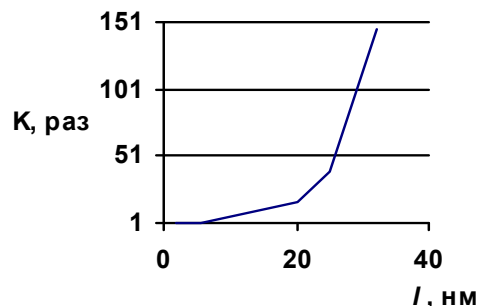


Рис. 3. Экспериментальная зависимость увеличения вычислительных затрат K решения уравнения Шредингера при увеличении линейных размеров

классических и квантомеханических моделей. Для остальных программных комплексов необходима разработка специализированных модулей для поддержки многомасштабного моделирования.

К отличительным особенностям наносистем необходимо также отнести междисциплинарность [9]. К сожалению, программное обеспечение, поддерживающее междисциплинарный анализ, реализовано только на классических моделях. Для полуклассических и квантомеханических моделей существующее программное обеспечение является специализированным, зачастую оказываясь применимым только для решения узкого круга задач.

2. Особенности оценки проектных решений в нанотехнологии

Отличительная особенность решения задач нанотехнологии состоит в том, что в инженерной практике выбор того или иного проектного решения выполняется на основе заданных ограничений [35]. В общем случае они выражаются в виде условий работоспособности, которые могут иметь следующие формы [14]:

$$y_i = T_i, \quad (1)$$

$$y_i \leq TL_i, \quad (2)$$

$$y_i \geq TU_i, \quad (3)$$

$$y_i < TL_i, \quad (4)$$

$$y_i > TU_i, \quad (5)$$

где y_i - i -й выходной параметр наносистемы;

TL_i , TU_i - допустимые значения i -го выходного параметра, указанные в техническом задании.

В инженерной практике задание условий работоспособности в виде равенства (1) практически не используется в связи со сложностью его физической реализации. Более того, учитывая, например, тот факт, что температура наносистемы меняется в некотором диапазоне, зависящем от размера и свойств системы, техническое задание, содержащее условия работоспособности наносистемы в виде (1), представляется физически нереализуемым.

Условия работоспособности наносистемы, заданные в виде (2)-(5), определяют допустимый диапазон изменения характеристик нано-

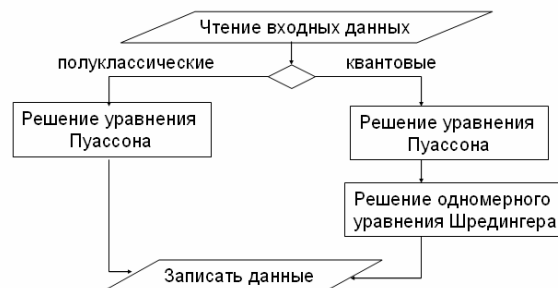


Рис. 4. Алгоритм работы программы SCHRED

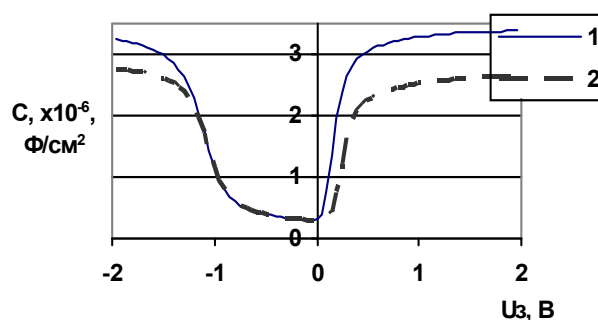


Рис. 5. Вольт-фарадная характеристика конденсатора при толщине диэлектрика 1 нм

системы, что в свою очередь приводит к возможности снижения требований к точности модели наносистем. При задании условий работоспособности в виде (2)-(5) в маршрутах проектирования наносистем на первый план выходит достоверность модели в заданном диапазоне изменения характеристик.

Поясним эту фундаментальную особенность нанотехнологии на примере.

На Рис. 4 представлена блок-схема алгоритма программы SCHRED [36], использующей модификации полуклассических методов с учетом квантомеханической коррекции, а также позволяющей выполнить моделирование на полуклассических моделях.

По этой программе [18-28, 36] выполнено моделирование МОП-конденсатора при различной толщине диэлектрика. На Рис. 5 приведена вольт-фарадная характеристика конденсатора при толщине диэлектрика 1 нм. Кривая 1 рассчитана на базе полуклассической модели, кривая 2 представляет результаты моделирования с использованием квантомеханической коррекции. На Рис. 6 представлена зависимость относительной погрешности моделирования на

полуклассической модели по сравнению с моделями с квантомеханической коррекцией, для вольт-фарадной характеристики конденсатора при толщине диэлектрика 1 нм. Анализ представленных результатов моделирования позволяет сделать вывод, что использование полуклассических моделей в диапазоне единиц нанометров приводит к значительной погрешности моделирования. Например, в представленном случае погрешность моделирования с использованием полуклассических моделей по сравнению с результатами моделирования с использованием квантомеханических моделей превышает 200%.

На Рис. 7 показана вольт-фарадная характеристика конденсатора при толщине диэлектрика 10 нм. Кривая 1 рассчитана с использованием полуклассической модели, кривая 2 представляет результаты моделирования с квантомеханической коррекцией. Приведенная на Рис. 6 зависимость относительной погрешности моделирования по полуклассической модели по сравнению с моделями с квантомеханической коррекцией, для вольт-фарадной характеристики конденсатора при толщине диэлектрика 10 нм показывает, что погрешность моделирования с использованием полуклассических моделей по сравнению с результатами моделирования с использованием квантомеханических моделей не превышает 50%. Однако практически для всего диапазона изменения напряжения наблюдается тенденция уменьшения относительной погрешности моделирования характеристики конденсатора при толщине диэлектрика 10 нм по полуклассической модели. Более того, анализ результатов моделирования, представленных на рисунках 5 и 7, позволяет сделать вывод, что при увеличении линейных размеров наносистема все более точно описывается полуклассическими моделями.

Необходимо заметить, что при оценке достоверности моделирования характеристик наносистемы с использованием различных моделей необходимо учитывать, что физические

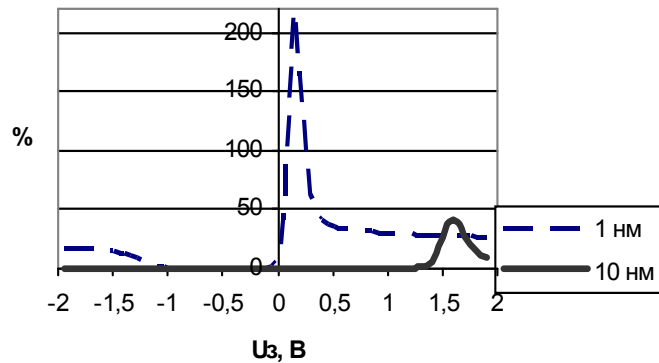


Рис. 6. Относительная погрешность моделирования с использованием полуклассической модели по сравнению с моделями, использующими квантово-механическую коррекцию

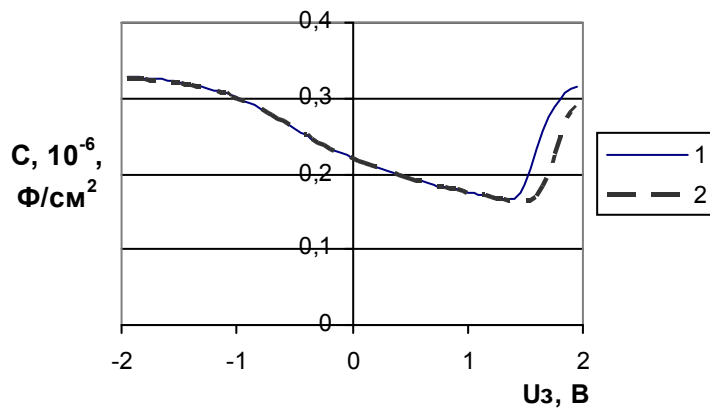


Рис. 7. Вольт-фарадная характеристика конденсатора при толщине диэлектрика 10 нм

ограничения классического компьютера также ограничивают применение квантомеханических моделей при моделировании наносистем большой размерности [37]. Причины, снижающие достоверность моделирования характеристик наносистемы, могут быть отнесены либо к статистическим ошибкам $\mathcal{E}_{\tilde{n}0}$, либо к систематическим ошибкам $\mathcal{E}_{\tilde{n}\tilde{n}}$.

Статистические ошибки обусловлены ограниченным временем компьютерного эксперимента и в практике нанотехнологии они не могут быть полностью устранены аналогично ошибкам, существующим при измерениях в инженерной практике.

Типичными источниками систематических ошибок при моделировании наносистем являются: ограниченный набор энергетических состояний; использование генератора псевдослу-

чайных чисел; ограниченный временной шаг при моделировании на основе молекулярной динамики; ошибки округления, связанные с ограниченностью разрядной сетки.

В связи с невозможностью устранения ошибок моделирования наносистем при использовании классических компьютеров условия работоспособности наносистемы должны быть проверены с учетом ошибок моделирования характеристик наносистем следующим образом:

$$y_i \pm \varepsilon(\varepsilon_{\tilde{n}0}, \varepsilon_{\tilde{n}\tilde{n}}) \leq TL_i, \quad (6)$$

$$y_i \pm \varepsilon(\varepsilon_{\tilde{n}0}, \varepsilon_{\tilde{n}\tilde{n}}) \geq TU_i, \quad (7)$$

$$y_i \pm \varepsilon(\varepsilon_{\tilde{n}0}, \varepsilon_{\tilde{n}\tilde{n}}) < TL_i, \quad (8)$$

$$y_i \pm \varepsilon(\varepsilon_{\tilde{n}0}, \varepsilon_{\tilde{n}\tilde{n}}) > TU_i, \quad (9)$$

где $\varepsilon(\varepsilon_{\tilde{n}0}, \varepsilon_{\tilde{n}\tilde{n}})$ - погрешность моделирования наносистемы, зависящая от статических и систематических ошибок. Заметим, что оценка погрешности моделирования наносистемы может быть выполнена на основе методики, изложенной в [38].

Для преодоления проблемы физических ограничений достоверности моделирования характеристик наносистем необходимо использовать квантовые компьютеры, которые в настоящее время находятся только в стадии разработки.

Другим подходом является разработка модифицированных алгоритмов, позволяющих минимизировать систематические ошибки моделирования наносистем на классических компьютерах.

Заключение

Анализ результатов, представленных в статье, позволяет сделать вывод, что при проектировании наносистем в общем случае необходимо использование моделей всех уровней иерархии. Применение интегрированных маршрутов проектирования наносистем, которые могут поддерживать моделирование на всех уровнях иерархии: с использованием классических, полуклассических и квантомеханических моделей, а также обеспечивать связь между различными уровнями иерархии, имеет наибольшее прикладное значение в нанотехнологии.

Несмотря на то, что современные высокопроизводительные вычислительные системы

позволяют выполнить моделирование наносистем на основе шредингеровских моделей с линейными размерами до десятков нанометров, при проектировании наносистем в инженерной практике необходимо учитывать особенности моделирования наносистем. Использование шредингеровских моделей при проектировании наносистем может привести к значительному увеличению вычислительных затрат и погрешности модели $\varepsilon(\varepsilon_{\text{ст}}, \varepsilon_{\text{чис}})$. В связи с этим рекомендуется использовать шредингеровские модели при проектировании наносистем с линейными размерами менее 1 нм. В остальных случаях использование шредингеровских моделей при проектировании наносистем следует минимизировать. Зачастую полуклассические модели, несмотря на то, что они являются более простыми по сравнению с квантомеханическими моделями, позволяют корректно оценить диапазон изменения характеристик различных альтернативных проектных решений. Однако на этапе окончательной оценки выбранного проектного решения представляется целесообразным выполнить моделирование характеристик наносистем с помощью более сложных моделей.

Литература

1. Пул Ч. (мл.), Оуэнс Ф. Нанотехнологии: Учеб. пособие для вузов: Пер. с англ. / Ред. пер. Головин Ю.И.; Доп. Лучинин В.В. 2-е изд., доп. М., Техносфера, 2006.- 334 с.
2. Дж. М. Мартинес-Дуарт, Р. Дж. Мартин-Палма, Ф. Агулло-Рueda. Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники. Техносфера, 2007, 368 с.
3. Валиев К.А., Лукичев В.Ф., Орликовский А.А. Кремниевая наноэлектроника: проблемы и перспективы. Нанотехнологии и материалы, 2005, с.17–29.
4. Шахнов В.А., Панфилов Ю.В., Власов А.И. и др. Наноразмерные структуры: классификация, формирование и исследование. М., МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2008. – 100 с.
5. K. Eric Drexler. Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing and Computation. John Wiley and Sons, NY, 1992.
6. N. Taniguchi. On the Basic Concept of 'Nano-Technology'. Proc. Intl. Conf. Prod. Eng. Tokyo, Part II, 1974, Japan Society of Precision Engineering.
7. E. Drexler. Toward Integrated Nanosystems: Fundamental Issues in Design and Modeling. Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, Volume 3, Number 1, February 2006, pp. 1-10.
8. Лучинин В.В. Введение в индустрию наносистем. Нано- и микросистемная техника, 2007, №8 (85), с. 2–7.

9. Библиотека наноинженерии. Под ред. Шахнова В.А. Москва, 2008.
10. Зинченко Л.А., Сорокин Б.С. Бионические информационные системы в проектировании микро- и наносистем. Труды 11-й национальной конференции по искусственному интеллекту КИИ 2008, М., ЛЕНАНД, 2008, т.3, с. 17 – 25.
11. Фон Нейман Дж. Вероятностная логика и синтез надежных организмов из ненадежных компонент. Автоматы, под ред. Шеннона К.Э. и Маккарти Дж. М.: ИЛ, 1956. С. 68 - 139.
12. Зинченко Л.А., Сорокин С.Н. Эволюционное проектирование элементов телекоммуникационных систем. ТРТУ, 2003. 160 с.
13. Месарович М., Мако Д., Такахара И. Теория иерархических многоуровневых систем. М. Мир, 1973г. 344с.
14. Норенков И.П. Основы автоматизированного проектирования: Учебник для вузов.- 3-е изд., перераб. и доп. М., Изд-во МГТУ им.Н.Э. Баумана, 2006. 446 с.
15. Р.Фейнман, Р.Лейтон, М.Сэндс. Фейнмановские лекции по физике. М.: «Мир», 1966г.
16. Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology. Под ред. M. Rieth, W. Schommers. American Scientific Publishers, 2006.
17. Han J., Globus A., Jaffe R., Deardorff G. Molecular dynamics simulations of carbon nanotube-based gears. Nanotechnology, 1997, 8, №3, pp. 95-102.
18. <http://cse-online.net/molecularchem.html>
19. <http://pubs.acs.org/journal/nalefd>
20. <http://www.nano.gov>
21. <http://www.nanotechnology.com>
22. <http://www.ipt.arc.nasa.gov>
23. <http://www.nanohub.org>
24. <http://www.nanoforum.org>
25. <http://www.nano-initiative-munich.de>
26. <http://www.nano.org>
27. <http://www.nano.org.uk>
28. <http://nanoparticles.org>
29. <http://www.silvaco.com>
30. <http://cse-online.net/quantum-chemistry.html>
31. <http://www.crosslight.com>
32. <http://www.synopsys.com>
33. В.Б. Бетелин, Е.П. Велихов, А.Г. Кушниренко. Массовые суперкомпьютерные технологии – основа конкурентоспособности национальной экономики в XXI веке. Информационные технологии и вычислительные системы, 2007, №2, с. 3-10.
34. В.В.Воеводин. Вычислительная математика и структура алгоритмов. М., Изд-во МГУ, 2006. 112 с.
35. Курейчик В.М., Курейчик В.В., Зинченко Л.А. и др. Оптимизационные структуры при проектировании на основе методов гомеостатики, эволюционного развития и самоорганизации. Изд-во ТРТУ, 2003, 150 с.
36. D. Vasilevska, D. K. Schroder and D.K. Ferry, Scaled silicon MOSFET: Part II - Degradation of the total gate capacitance, IEEE Trans. Electron Devices 44, 584-7 (1997).
37. Feynman R. Simulating physics with computers. International Journal of Theoretical Physics, 21, 1982, pp. 467-488.
38. H. Flyvbjerg, H. G. Petersen. Error Estimates on Averages of Correlated Data. J. Chem. Phys., 1989, 91:461.

Зинченко Людмила Анатольевна. Профессор МГТУ им. Н. Э. Баумана. Окончила Таганрогский радиотехнический институт в 1987 году. Доктор технических наук. Имеет 197 печатных работ из них 10 монографий и учебных пособий. Область научных интересов: информационные технологии, САПР, моделирование. E-mail: lzinchenko@bmstu.ru.

Шахнов Вадим Анатольевич. Заведующий кафедрой в МГТУ им. Н. Э. Баумана. Московское высшее техническое училище им. Н. Э. Баумана в 1966 году. Доктор технических наук, профессор, член-корреспондент РАН. Имеет более 170 печатных работ из них 7 монографий и 14 учебников и учебных пособий. Область научных интересов: информационные технологии, наноинженерия, вычислительная техника. E-mail: shakhnov@mail.ru.