

УДК 519.688

О ПРОГРАММНОМ ОБЕСПЕЧЕНИИ МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНООБЪЕКТОВ

Михайлов И.С.

ГОУ ВПО «Ульяновский государственный университет», Ульяновск, Россия, e-mail: tavork@fax.ru

В данной статье дан обзор свободно распространяемых программных средств моделирования нанообъектов, описана возможность использования распространенных CAD-, CAE-систем для моделирования свойств наносистем несколькими методами. На базе открытого исходного кода программного обеспечения Nanoengineer-1 реализована интеграция моделей, исследуемых методами молекулярной динамики, с CAD-, CAE-системами посредством формата STEP, а также реализовано ускорение метода молекулярной динамики посредством использования потенциала межатомного взаимодействия, основанного на ортогональных финитных функциях (ОФФ).

Ключевые слова: молекулярная динамика, ортогональные финитные функции, механика сплошных сред, CAD, CAE, ANSYS, Nanoengineer, STEP.

ABOUT THE SOFTWARE FOR MODELLING OF NANOOBJECTS

Mikhaylov I.S.

Ulyanovsk State University, Ulyanovsk, Russia, e-mail: tavork@fax.ru

The review of free software for modeling of nanoobjects is given in this article and described the possibility of use CAD-, CAE-systems for modeling of properties of nanosystems by several methods. Some researches have been spent by modifications of open initial code of software Nanoengineer-1. The integration of nanomodels with CAD-, CAE-systems is realized by format STEP. The acceleration of the method of molecular dynamics is realized by use of potential of the interatomic interaction based on orthogonal finite functions.

Key words: molecular dynamics, orthogonal finite functions, continuum mechanics, CAD, CAE, ANSYS, Nanoengineer, STEP.

1. ПРОГРАММНЫЕ ПРОДУКТЫ.

1.1. ОБЗОР ПРОГРАММНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ РАБОТЫ В НАНОМАСШТАБЕ

Существует множество программных средств, ориентированных на исследования нанообъектов. В этих программах используются различные способы исследования состояния совокупностей атомов и молекул и, в частности, расчета их потенциальной энергии.

В данном обзоре рассмотрены только свободно распространяемые программные средства, не специализированные на одной задаче.

Наиболее удобный интерфейс – у программного продукта Nanoengineer-1 компании Nanorex [1]. В программе предусмотрено моделирование по основным параметрам

нанотрубок, ДНК, пептидов, графена, кристаллических решеток. Имеется несколько настроек по визуализации, в том числе по созданию трехмерного изображения. Отличительной особенностью программы является возможность построения простейших механизмов из молекул. Наносистемы анализируются несколькими методами молекулярной динамики и квантовой химии, определяемыми подключаемыми модулями.

Vega-ZZ от Drug Design Laboratory [2], в отличие от Nanoengineer-1, специализирована на химии, в программе нет возможностей быстрого моделирования нанотрубок или ДНК, но представлена обширная библиотека химических соединений. В Vega-ZZ большой выбор настроек анализа методом молекулярной динамики. Программа распространяется свободно, но требуется бесплатная регистрация через Интернет.

Программный продукт Nanotube Modeler компании JCrystalSoft [3] единственный из описываемых – условно бесплатная программа. Без регистрации стоимостью 100\$ за Classroom License программа может моделировать различные наносистемы: нанотрубки всех видов, включая закрытые; фуллерены, графены, наноконусы. Моделирование сопровождается информацией о декартовых координатах всех атомов.

Сравнение результатов моделирования нанотрубки хиральностью 10x10 и длиной 50 нанометров при температуре 3000 К для 500 итераций при шаге $5 \cdot 10^{-16}$ секунды, смоделированной в программе Nanoengineer-1 и переданной в формате PDB в Vega-ZZ, дает одни и те же значения потенциальной энергии в обеих программах.

1.2. CAD-, CAE-СИСТЕМЫ

Программный комплекс Nanoengineer-1 реализует принципы построения наноструктур и механизмов, предложенных в 1992 году знаменитым популяризатором нанотехнологий Drexler К.Е. [4]. Возможность моделирования сложных механизмов из атомов – вот основная идея Nanoengineer-1. Но если перейти на макроуровень моделирования, окажется, что на данный момент большинство исследований различных механизмов ведутся с помощью CAD-, CAE-систем, таких как Unigraphics, CATIA, AutoCAD, SolidWorks, ANSYS и других. Использование данных программных комплексов для решения некоторых задач наноуровня вполне оправдано по нескольким причинам.

Во-первых, все эти комплексы активно используются на крупных предприятиях, их интерфейс за годы использования значительно упростился, стал более удобным.

Во-вторых, такие распространенные наноструктуры, как нанотрубки и фуллерены, представляют собой полые оболочки или сферы. Их радиусы и длины во много раз превосходят толщину атомарного слоя. Исходя из этого, один из подходов моделирования нанотрубок основан на механике сплошных сред. В этом случае поверхность нанотрубки, составленная из атомов, рассматривается как сплошная оболочка или полый стержень. Использование теории многослойных анизотропных оболочек [5] дает метод моделирования нанообъектов, доступный в таком программном комплексе, как ANSYS.

В-третьих, возможно исследование дискретно-континуальных моделей [6], где все межатомные взаимодействия заменяются эквивалентными стержневыми системами.

В-четвертых, так как все CAD-, CAE-системы достаточно уникальны, существует проблема обмена данными и сохранности этих данных, из-за этого разработаны и активно используются универсальные форматы, такие как STEP и IGES. Наиболее универсальный из них, STEP, позволяет описать весь жизненный цикл изделия, включая технологию изготовления и контроль качества продукции. Для описания наносистем универсального стандарта еще не существует.

2. МОДИФИКАЦИЯ ОТКРЫТОГО КОДА ПРОГРАММЫ NANOENGINEER-1.

2.1. ИНТЕГРАЦИЯ С ФОРМАТОМ STEP

Программный комплекс Nanoengineer-1 выпущен по универсальной общественной лицензии GNU General Public License, это позволяет изучать и модифицировать исходный код данной программы для выполнения любых исследований.

В рамках данной работы были предложены несколько модификаций программного комплекса Nanoengineer-1, как ускоряющих исследование наносистем методом молекулярной динамики, так и открывающих возможность работать в комплексе программ для нано- и макроуровней. Все изменения реализованы в виде пакетов дополнений.

Экспорт моделей в Nanoengineer-1 возможен в своем собственном формате mmp (Molecular Machine Part), в формате pdb (Protein Data Bank), а также во многих

форматах данных, используемых при изучении атомов и молекул и поддерживаемых системой преобразования данных OpenBabel [7].

OpenBabel не поддерживает перевода данных из химических форматов в универсальные форматы CAD-, CAE-систем.

Разработанный в рамках данной работы модуль экспорта mmp-модели в step-формат [8] предоставляет возможность проводить всесторонний анализ наноконструкций различными методами.

2.2. ДОБАВЛЕНИЕ НОВОГО ПОТЕНЦИАЛА НА ОСНОВЕ ОРТОГОНАЛЬНЫХ ФИНИТНЫХ ФУНКЦИЙ

Используемый в программе Nanoengineer-1 модуль моделирования sim.dll содержит интерполятор, преобразующий формулы различных потенциалов межатомного взаимодействия в удобные для расчета на ЭВМ аналитические формы.

Так, например, для ковалентных связей реализован потенциал Липпинкотта–Морзе [4], который интерполируется кубическими многочленами.

Использование потенциала ортогональных финитных функций, предложенного в работе [9] вместо потенциала Липпинкотта–Морзе, ускоряет процесс моделирования методом молекулярной динамики за счет отказа от использования дополнительных интерполяций [10].

Таким образом, благодаря использованию концепции универсального формата данных STEP и нового потенциала межатомного взаимодействия, был усовершенствован открытый код программного комплекса Nanoengineer-1. Эти усовершенствования сделали работу с моделями в наномасштабе более удобной, а процесс моделирования методом молекулярной динамики более быстрым.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сайт компании Nanorex. – 2008 [Электронный ресурс]. URL: <http://nanoengineer-1.com/> (дата обращения: 10.06.2011).
2. Сайт Drug Design Laboratory. – 2010 [Электронный ресурс]. URL: <http://www.ddl.unimi.it/> (дата обращения: 10.06.2011).
3. Сайт JCrystalSoft. – 2011 [Электронный ресурс]. URL: <http://www.jcrystal.com/> (дата обращения: 10.06.2011).

4. Drexler K.E. Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing, and Computation. – New York: John Wiley & Sons, 1992. – P. 576.
5. Леонтьев В.Л., Михайлов И.С. Математическое моделирование нанообъектов, основанное на теории анизотропных многослойных оболочек // Обзорение прикладной и промышленной математики. – 2009. – Т. 16. – Вып. 5. – С. 881–882.
6. Гольдштейн Р.В., Ченцов А.В. Дискретно-континуальная модель нанотрубки // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2005. – № 4. – С. 57–74.
7. Supported File Formats and Option // Сайт проекта OpenBabel. – 2011 [Электронный ресурс]. URL: <http://openbabel.org/docs/2.3.0/FileFormats/Overview.html> (дата обращения: 10.03.2011).
8. Михайлов И.С. Программный модуль «Пакет дополнений "STEP экспорт" для программного комплекса Nanoengineer-1». – М.: ВНИИЦ, 2011. – № гос. рег. 50201150771.
9. Михайлов И.С., Леонтьев В.Л. Об использовании ортогональных функций с компактными носителями в математическом моделировании нанообъектов // Обзорение прикладной и промышленной математики. – 2010. – Т. 17. – Вып. 6. – С. 912–913.
10. Леонтьев В.Л., Михайлов И.С. Программный модуль «Пакет дополнений "Методы ОФФ" для программного комплекса Nanoengineer-1». – М.: ВНИИЦ, 2011. – № гос. рег. 50201150772.

Рецензенты:

Сергеев В.А., д.т.н., доцент, профессор кафедры «Радиотехника, опто- и наноэлектроника», директор Ульяновского филиала Учреждения Российской академии наук Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, г. Ульяновск.

Вельмисов П.А., д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой высшей математики Ульяновского государственного технического университета, г. Ульяновск.

Работа получена 06.07.2011