

УДК 620.18

Квантовая нанотехнология и квантовая химия

Е. Ф. Шека

ЕЛЕНА ФЕДОРОВНА ШЕКА — доктор физико-математических наук, профессор, заведующая научно-исследовательской лабораторией Российского университета дружбы народов (РУДН). Область научных интересов: вычислительная нанотехнология, физика и химия наноматериалов и нанотехнологических процессов.

117302 Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3, РУДН, тел./факс (095) 954-03-36, E-mail: sheka@icp.ac.ru

Квантовая нанотехнология

История технологии приобретает удивительное освещение, если в основу построения исторической цепочки положить универсальную метрическую меру — рост человека. Рост большинства людей составляет около двух метров*. Действительно, с самого начала зарождения производства предметов, используемых человеком, эта мера была определяющей, так как ни сами предметы, ни механизмы, используемые при их изготовлении, начиная от палки и топора и кончая современными станками, было бы неразумным делать слишком малыми. Это относится к большинству механических устройств, окружающих нас и в настоящее время, начиная с современных автомобилей и кончая новейшими конструкциями стереосистем, используемых в них. Таким образом, окружающий нас мир вещей и механизмов в своем преобладающем большинстве является продуктом *метровой технологии*.

В то же время миниатюризация вещей и механизмов была неизбывной мечтой умельцев всех времен и народов. Вспомним хотя бы лесковского Левшу. Однако размер механических деталей определяется, во-первых, материалом, из которого они сделаны, и, во-вторых, размерами машин и механизмов, с помощью которых эти детали изготовлены. Оба обстоятельства накладывают серьезные ограничения на миниатюризацию деталей. Эти ограничения, как показывает история, могут быть преодолены лишь с огромными трудностями и затратами и только тогда, когда это становится совершенно необходимым, как это было в случае с наручными часами. Достигнутую при этом миниатюризацию механических процессов можно считать предельной для метровой промышленной технологии.

Переход к широкомасштабной *миллиметровой технологии* состоялся в середине XX в. и был обусловлен возникновением промышленной электроники. Примером настоящего чуда миллиметровой технологии яви-

лась вакуумная лампа. Последующее сокращение размеров оперируемого пространства в 1000 раз привело нас в мир твердотельной *микротехнологии*. Ее создание и развитие прошло красной линией через вторую половину XX в. и составило основу поразительного прогресса вычислительной техники. Люди научились размещать миллион твердотельных транзисторов в интегральной схеме площадью 1 см². Кристаллы кремния явились основой интегральных микросхем, миниатюризация которых и обусловила экспоненциально быстрый рост эффективности и быстродействия на единицу стоимости (и массы) вычислительных машин с периодом удвоения два года. Рекордные результаты по миниатюризации микросхем на кремнии были достигнуты в 90-х г. XX в. с помощью *электронной литографии*. Техника электронной литографии отточена и совершенна и ее можно считать апофеозом микротехнологии. Ей под силу воспроизведение любого «узора» на микронном и субмикронном уровнях, имеющих отношение не только к интегральным схемам, но и к другим уникальным «микропродуктам». Несмотря на столь разительный успех микротехнологии, несмотря на практически полное отличие как микропродуктов, так и способов их изготовления от изделий метровой технологии, обе промышленные схемы объединяет общность классических законов, определяющих их работу, таких, например, как закон Ома, который одинаково справедлив и для бытового электронагревателя, и для интегральной микросхемы. Таким образом, все технологии — от метровой до микрометровой — могут быть объединены одним словом — *классические*.

Это «золотое правило» начинает нарушаться при размерах, составляющих десятки доли микрометра. За этой гранью начинается территория, подвластная квантовым законам, в которых проявляет себя волновая природа электрона. И это именно та территория, на которой предстоит осуществляться нанотехнологии. Что же нас ожидает, когда микронный размер будет уменьшен в 1000 раз? Первый ответ можно дать сразу: в этой области не работают законы классических технологий, обсужденные выше. И с этой точки зрения нанотехнология является *квантовой*. Второй ответ тоже очевиден: мы переходим от сплошных веществ классических технологий к атомно-структурным веществам квантовой

*Огромное многообразие линейных мер, использовавшихся (а до некоторой степени и продолжающих использоваться и поныне) в разных странах как раз и связано с усредненными длинами частей человеческого тела. В России — вершок, локоть, аршин и сажень, в Германии — фут, в Англии — фут и ярд и т. д. Сажень (рост в 2,134 м) как основная мера длины (1 верста = 500 сажений, 1 аршин = 1/3 сажени, 1 фут = 1/7 сажени и т. д.) употреблялась в России вплоть до 1924 г.



Рис. 1. Область нанотехнологии

нанотехнологии*. Третий ответ: человечество вступает в «производственную» область, в которой исчезает грань между живой и неживой природой. Области характерных размеров для ряда наноразмерных образований приведены на рис. 1.

При взгляде на эту шкалу (см. рис. 1) такие проекты, как производство самовоспроизводящихся роботов, с одной стороны, и клеточных роторных моторчиков, с другой, не кажутся ни фантастическими, ни неосуществимыми. Знаменитые слова о том, что «внизу еще очень много свободного места», принадлежащие Р. П. Фейнману (R. Feinman) и произнесенные им в 1960 г. [2], сегодня звучат пророчески. «В году 2000, — продолжал он, — посмотрев назад, все будут очень удивляться, почему вплоть до 1960 г. никто серьезно даже не смотрел в этом направлении». В 1983 г. один из пионеров наноразмерных компьютеров Ф. Картер (F. Carter) предсказал, что микроэлектронные интегральные схемы пересекут нанометровую границу около 2020 г. Однако начало практической нанотехнологии было ознаменовано изобретением в 1982 г. [3] сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). Этот микроскоп и очень похожий на него сканирующий проектор электронно-лучевой литографии (СПЭЛЛ) и явились прообразами фейнмановской машины будущей нанотехнологии. Так, с помощью сканирующего туннельного микроскопа оказалось возможным перемещение индивидуальных атомов и молекулярных фрагментов по поверхности подложки в заранее определенные места. Этим было положено начало программируемому атомному письму (рис. 2), явившемуся прообразом первого нанотехнологического процесса собирания атомов в наноразмерные «кучки» и выстраивания этих кучек в соответствии с заданным рисунком. Новые термины — квантовые точки, квантовые диполи, квантовые проволоки — становятся главными терминами квантовых интегральных схем наноразмерных квантовых компьютеров ближайшего будущего. Одиночные квантовые точки (см. рис. 2а), образованные группой атомов и локализованные в заданном месте основной матрицы, могут быть собраны, образуя проволоку (см. рис. 2б). Элементы проволоки, в свою очередь сгруппированные заданным образом, образуют уже работающие элементы квантовых компьютеров в виде полевых транзисторов (см. рис. 2в) и простейших интегральных схем — нейронов (см. рис. 2д). Нанотехнологию еще называют молекулярным производством. Естественная молекулярная технология, или мокрая [9] технология, со-

бирая свои системы по принципу от малого к большому, или «снизу вверх», создала все многообразие живых трехмерных систем, естественной средой обитания которых является вода. Само существование живых организмов, чья форма, функционирование и эволюция определяются взаимодействием наноразмерных структур, является убедительным свидетельством успеха этого технологического процесса. Искусственная молекулярная технология, или сухая [9] нанотехнология, работает «сверху вниз», от трехмерных неорганических веществ классических технологий к двумерным и одномерным распределениям наноразмерных элементов, выполняющих функции электронных, магнитных и оптоэлектронных устройств. Существенным отличием квантовой нанотехнологии от классических является также и то обстоятельство, что к двум перечисленным выше компонентам добавляется третий — *вычислительная нанотехнология*. В отличие от всех предшествующих периодов развития технологий, возможность предварительного конструирования, моделирования и расчета желанных систем является существенным требованием молекулярной технологии, вследствие чего компьютерное моделирование становится технологическим средством производства.

Вычислительная нанотехнология как средство производства

Как любое средство производства, вычислительная нанотехнология должна производить и/или обслуживать большой массив наноразмерных систем. При этом вычислительный процесс должен быть эффективен во времени. Эти требования накладывают достаточные жесткие ограничения на выбор вычислительных средств, включающих как методы расчета, так и вычислительные устройства. Естественно, что квантовая природа нанотехнологии требует соответственно квантово-механического способа описания свойств веществ и происходящих с ними процессов и/или реакций. До последнего времени для атомных систем размером более нескольких ангстрем это было в значительной степени нереальным. В настоящее же время границы области квантовой теории существенно раздвинулись, так что сегодня квантово-механическому рассмотрению подвластны нанообъекты с размером до 10 нм, состоящие из нескольких тысяч атомов. Таким образом, становится возможным уже не «моделирование» исследуемого объекта, заменяющее описание целого описанием малой его части, что концептуально ущербно по своей сути, а «изображение его портрета». Это стало возможным в результате резкого качественного изменения как вычислительных алгоритмов, так и вычислительных машин, произошедшего на границе XX и XXI вв.

* Естественно, атомно-корпускулярная и сплошная структура вещества представляют собой предельные случаи, разделенные широкой областью, в которой сплошно-структурное представление о веществе оказывается еще применимым и к реальным объектам нанотехнологии [1].

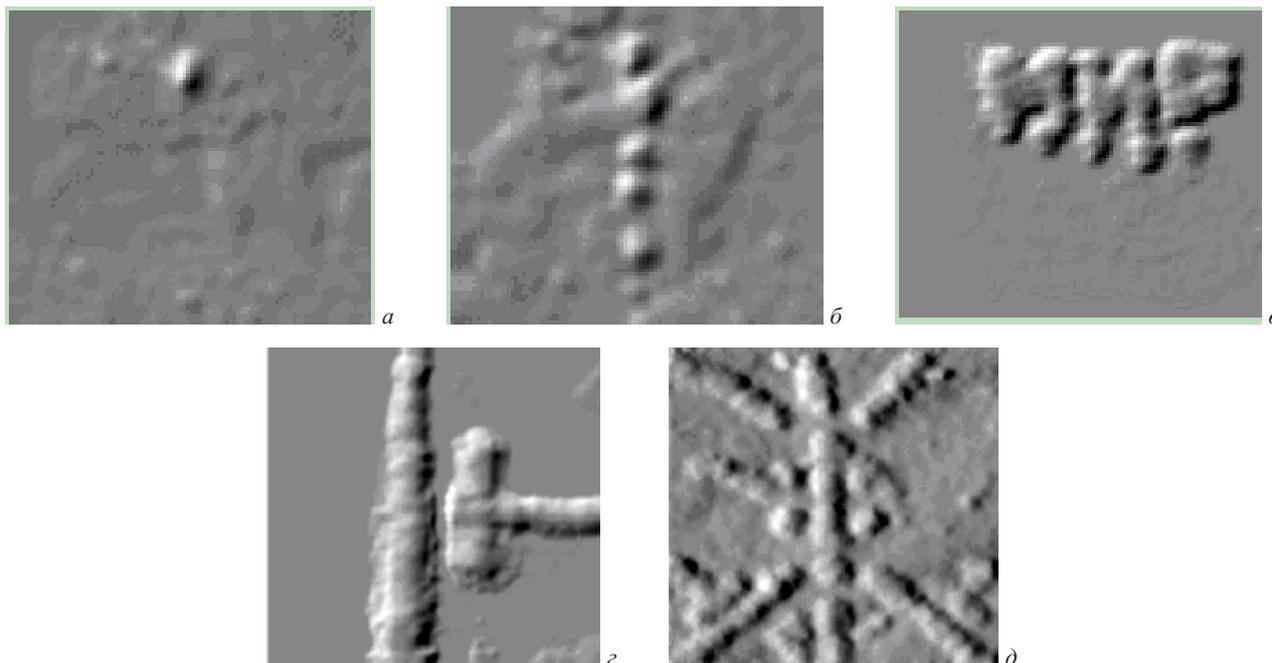


Рис. 2. Атомное письмо. Точки, составляющие буквы, собраны из фрагментов молекул трихлорэтилена, полимеризующихся на поверхности углеводородной пленки в результате реакции привитой олигомеризации, стимулированной электрическим полем иглы СТМ [4–7]: а–в — размер кадра $0,4 \times 0,4$ мкм; поперечный размер точек 40 нм; г, д — СТМ изображение полевого транзистора (г) и квантовой интегральной схемы нейрон (д) [8]; размер кадра $0,4 \times 0,4$ мкм.

© 1995. Научно-исследовательский институт «Дельта», Россия

Современные вычислительные алгоритмы

Почти двадцатилетнее практическое применение квантово-химических средств к проблемам нанотехнологии привело к естественному отбору «работающих» средств, среди которых первое место занимают программы, основанные на полуэмпирических методах квантовой химии [10]. Среди этих методов следует выделить методы самосогласованного расчета уравнений Хартри–Фока в однодетерминантном приближении, такие, как MNDO [11], NDDO [12] и NDDO-WF [13]. В последние годы разработаны эффективные алгоритмы последовательных [14–16] и параллельных кодов [17–19] соответствующих программ, что и обуславливает возможность портретирования реальных объектов. Критика заведомой, с точки зрения строгой теории, неточности этих методов оказалась существенно преувеличенной [20]. Как оказалось, успех применения квантовых расчетов к решению конкретных химических или нанотехнологических проблем связан не столько с точностью самих методов, сколько с опытом их применения в исследуемой области. И в связи с этим хочется еще раз напомнить слова Н. Ф. Степанова о том, что «... результаты квантово-химических расчетов необходимы в основной своей массе не для знания точных величин тех или иных свойств молекул, а для сравнительного анализа поведения этих величин при переходе от одной молекулы к другой, при переходе от одной изомерной формы к другой и т. д. Такой анализ опирается на систему определенных корреляций». В целом вся химия (и нанотехнология; — Е. Ш.) представляет собой в существенной степени корреляционную науку. Сами по себе эти корреляции не зависят от того, найдены ли они чисто эмпирически или на основании теоретических соображений. Тем не менее

при их поиске всегда полезно иметь некую единую теоретическую конструкцию, служащую основой и обеспечивающую направление такого поиска. Во многих случаях именно такой конструкцией и является квантовая химия, обеспечивающая к тому же и обоснование многих эмпирических закономерностей» [21]. И сегодня такие мощные программные пакеты ССП квантово-химических расчетов как MOPAC, CLUSTER-Z1, CLUSTER-Z2, MP-ZAVA, NANOPACK, NANOVIOR [14–19] в полной мере обеспечивают надежность установления искоемых корреляций, позволяя быстро и эффективно рассчитывать большое число различающихся наноразмерных молекулярных систем.

Стимулированные требованием времени на путь прагматичных эмпирических расчетов становятся и «первопринципные» методы, такие, как Х-параметризованный метод конфигурационного взаимодействия Х-PCI [20], широко применяемый эмпирический метод функционала плотности B3LYP [20], многочисленные разновидности смешанных методов QM/MM, объединяющих квантовую и молекулярную механику применительно к большим системам [22] и др. Последние особенно популярны при расчетах биологических объектов. В области же сухой нанотехнологии наиболее существенные результаты получены пока с применением ССП методов.

Вычислительные комплексы

Успешное применение вычислительной нанотехнологии теснейшим образом связано с прогрессом в развитии вычислительных машин и с переходом к широкомащтабным параллельным вычислениям. На рис. 3 представлен современный уровень ускорения ССП кванто-

Сравнительные характеристики компьютеров [23, 24]

Характеристика	Кластер РИП Intel*	МВС-1000М**	Cray-T3E
Процессор	РИП	Alpha 21264	Alpha 21164
Тактовая частота, МГц	667	667	300
Число процессоров	16	128	128
Ширина канала точка–точка, МБ/с	100	1280	4000
Полная память, ГБ	4	64	16
Память на один процессор, МБ	256	512	128
Время доступа к памяти, нс	8	10	10
Архитектура	МПП, свич-коммутация	МПП, свич-коммутация	МПП, трехмерный тор

* 16-процессорный кластер, сборка ИПХФ РАН (Черноголовка, Россия), 2000.

** Сборка Межведомственного Суперкомпьютерного центра (Москва, Россия), 1999. <http://www.jscc.ru/cgi-bin/chow.cgi?/about.html%203#hardres>.

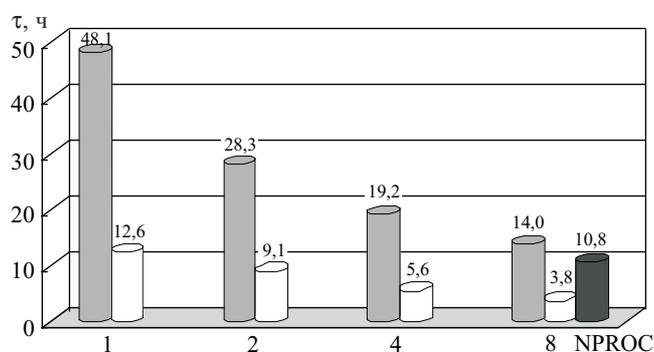


Рис. 3. Общее время вычислений для кластера TiO_2+H_2O на системах: □ – кластер Intel РИП, ■ – МВС-1000М; ■ – Cray-T3E [23, 24]

во-химических расчетов в параллельных кодах для одной и той же тестовой системы на разных машинах. Опыт широкомасштабного тестового расчета суммирован в табл. 1 и 2.

Анализ результатов этого и подобных расчетов всегда интересен, поскольку позволяет выявить общие тенденции зависимости эффективности расчетов как от используемых алгоритмов, так и от выбора вычислительных машин. Выбор квантово-химического алгоритма расчетов зависит как от конкретной решаемой проблемы, так и от опыта рассчитывающего технолога. Что же касается выбора компьютера, то он может быть в значительной степени формализован, как показывают приведенные ниже результаты сравнительного анализа.

При одной и той же тактовой частоте МВС-1000М компьютер, собранный на процессорах Alpha 21264, вдвое более эффективен, чем Кластер РИП Intel. Различие обусловлено разной эффективностью процессоров и увеличивается при росте числа используемых процессоров NPROC.

При переходе от МВС-1000М к Cray-T3E, построенному на процессорах того же типа, что и МВС-1000М, но с уменьшенной в два раза тактовой частотой, эффективность расчетов снижается в два раза. Снижение скорости увеличивается при росте числа процессоров NPROC.

Оперативная память процессора 256 Мбайт достаточна для размещения каждой из тестовых задач на одном процессоре, который и в случае параллельных вычислений всегда работает со значительной частью полного набора данных. Однако оперативной памяти процессора 128 Мбайт оказывается уже недостаточно. Таким образом, при использовании Cray-T3E для размещения первой тестовой задачи понадобилось четыре процессора, а для второй – восемь.

Распараллеливание ССП вычислений в комплексе NANOPACK является мелкозернистым, поскольку оно касается операций диагонализации и перемножения матриц [23, 24]. Для распараллеливания этих операций обычно используется библиотека ScaLAPACK [25]. Вычислительные приемы этой библиотеки существенно ограничивают масштабирование процесса вычислений по числу процессоров. Насыщение ускорения наблюдается при $NPROC \leq \sqrt{NORBS} / 5$, где NORBS – число атомных орбиталей. С этим фактом приходится мириться при решении уравнений Хартри–Фока.

Крупноблочное распараллеливание оказывается возможным при решении колебательных задач больших систем. В отличие от матрицы Фока, расчет гессииана (матрица вторых производных полной энергии по ядерным координатам) колебательной задачи может быть разделен на $3N$ независимых вычислений (здесь N – число атомов) столбцов матрицы, что составляет основу крупноблочного распараллеливания $3N$ -го порядка [26].

Примеры решения нанотехнологических задач

Одним из первых применений квантовой химии к решению практической задачи нанотехнологии было рассмотрение возможности «атомного письма» на поверхности углеводородной пленки [4–7]. Рассматривалось влияние электрического поля острой или тупой иглы на взаимодействие молекул трихлорэтилена с поверхностью пленки. Поле иглы моделировалось специально подобранной конфигурацией точечных зарядов. Было обнаружено, что при достижении электрическим потенциалом порогового значения при положительно заряженной тупой игле (поперечный размер острия составлял ~ 5 А) происходит отрыв атома хлора от молекулы трихлорэтилена и атома водорода с поверхности пленки и, как

Таблица 2

Время вычислений (с) с использованием программного пакета NANOPACK [23, 24]

Компьютер	NPROC			
	1	2	4	8
NDDO режим (8Si_{60} , NORBS*=1920, 5 ССП итераций)				
Кластер PIII Intel	6270	4559	4559	3982
MBC-1000M	3649	2528	1710	1209
Cray-T3E	—	—	3733	2356
NDDO-WF режим ($\text{TiO}_2+\text{H}_2\text{O}$, NORBS*=2014, 28 ССП итераций)				
Кластер PIII Intel	125069	68712	52772	40105
MBC-1000M	51763	34654	18153	10532
Cray-T3E	—	—	—	34495

* NORBS определяет число атомных орбиталей

следствие, привитие молекулярного остатка к поверхности путем образования химической связи С—С. Одновременно в среде молекул трихлорэтилена, находящихся под иглой, происходит образование свободных радикалов, которые обеспечивают реакцию привитой олигомеризации молекул трихлорэтилена на поверхности пленки. Именно эта стимулированная электрическим полем иглы реакция привитой полимеризации, обнаруженная в результате расчета, и легла в основу получения квантовых точек, проволок и элементов электронных схем, показанных на рис. 2.

Необходимость выяснения причины эмпирически установленного увеличения жесткости силиконовых (диметилсилоксановых) полимеров при добавлении наполнителя в виде наноразмерных частиц кремнезема послужила стимулом исследования [27–34] процессов, происходящих на границе раздела наночастица—полимер. На рис. 4 показаны фрагменты полимера, частица кремнезема и рассмотренная модель места контакта этих компонентов реального размера. В результате обширного вычислительного эксперимента было установлено, что на границе раздела осуществляется физическая адсорбция полимера, связываемого с поверхностью силами Ван-дер-Ваальса. Вследствие этого межмолекулярное взаимодействие оказывает лишь слабое влияние на структуру и электронные свойства полимера. Однако этого взаимодействия достаточно для того, чтобы место контакта служило стопором для механохимической реакции разрушения полимера, протекающей по радикальному механизму.

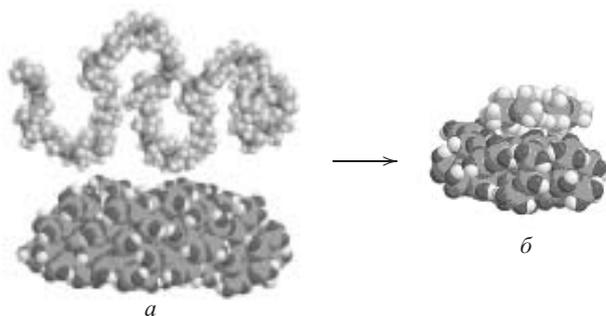
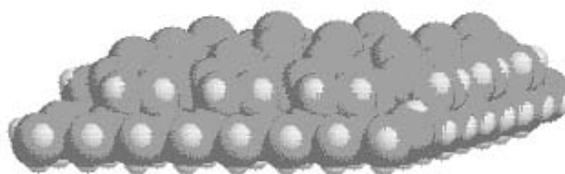


Рис. 4. (а) Граница раздела наночастица кремнезема — полидиметилсилоксан и (б) место контакта

Рис. 5. Равновесная структура расширенной элементарной ячейки поверхности $\text{Si}(111)(7 \times 7)$

Попытки практического осуществления контролируемого «атомного письма» на $(111)(7 \times 7)$ поверхности кристалла кремния, выбранной в качестве основы для создания элементов электронных схем по типу, показанных на рис. 2, вопреки ожиданию окончились неудачей. Это побудило поставить вычислительный эксперимент по исследованию свойств поверхностей этого кристалла [35–39]. В процессе расчета была полностью воспроизведена сложная структура пятислойной элементарной ячейки поверхности, включающей 200 атомов, из которых 19 атомов имеют неспаренные электроны. Как показали расчеты, поверхность должна обладать металлической проводимостью, что согласовалось с имеющимися на то время экспериментальными данными [40], и является магнитной. На рис. 5 показана оптимизированная структура расширенной элементарной ячейки поверхности, а на рис. 6 приведено распределение спиновой плотности по атомам этой ячейки, отвечающее состоянию со спиновой мультиплетностью (СМ), равной 23 ($\text{СМ} = N_{\text{несп.эл}} + 1$) [41]. Как и металлическая проводимость, предсказанные магнитные свойства поверхности были обнаружены экспериментально [42, 43]. Магнито-металлический характер поверхности позволил объяснить неудачные попытки атомного письма на ней.

В отличие от поверхности $(111)(7 \times 7)$, на поверхности (001) , как показали расчеты, можно создать любой желаемый магнитный рисунок [41]. На рис. 7 приведены различные структуры поверхности с реконструированными мотивами $(2 \times 1)\text{-H}$ и (2×1) . Последний обладает ферромагнитными свойствами, а его создание осуществляется в результате десорбции атомов водорода с поверхности $(2 \times 1)\text{-H}$, стимулированной электрическим полем иглы сканирующего туннельного микроскопа. Ма-

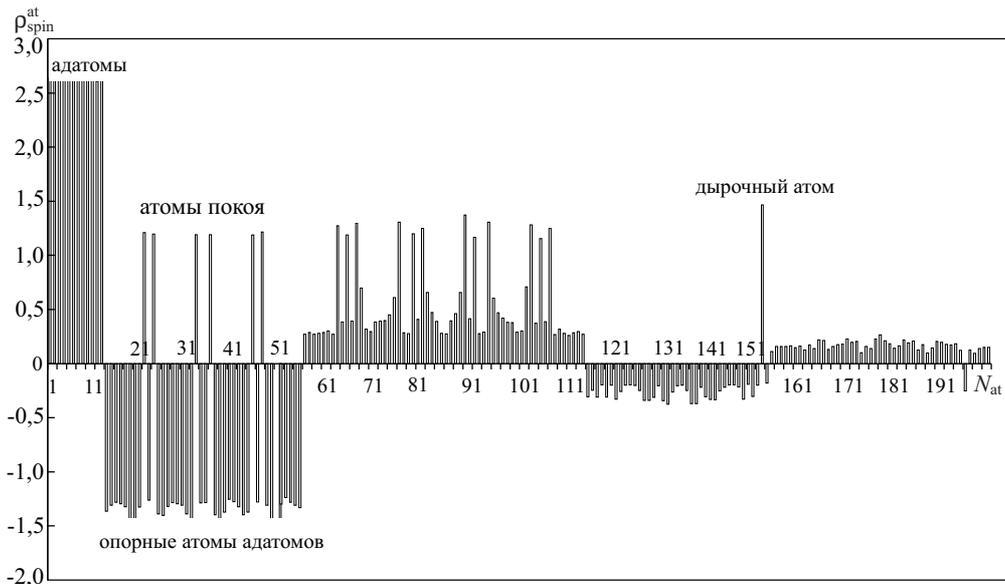


Рис. 6. Распределение спиновой плотности по атомам элементарной ячейки поверхности Si(111)(7×7), CM=20:

Слева направо адатомы сменяются атомами первого слоя, затем следуют атомы второго, третьего и четвертого слоев [41]

лый размер элементарных ячеек делает магнитный рисунок практически непрерывным.

Поиск наноструктур кремния, пригодных для производства наноразмерных элементов электронных схем, не ограничивается поверхностями кристалла и пористым массивным веществом, но идет в направлении обнаружения фуллереновых структур, подобных углеродным. Несмотря на огромные усилия исследователей кремниевые фуллерены пока оказались экспериментально недоступными. И лишь в последнее время были получены обнадеживающие результаты, относящиеся к кремниевым волокнам, осажденным при магнетронном распылении кристалла на поверхность высокоориентированного пиролитического графита [45]. Вычислительная нанотехнология не осталась в стороне от этого важного эмпирического факта и предложила свое видение реальных волокон [46–48]. На рис. 8 приведен рассчитанный фрагмент волокна, механизм образования которого объясняется двумя процессами олигомеризации молекулы кремниевого фуллерена, в данном случае молекулы Si₆₀.

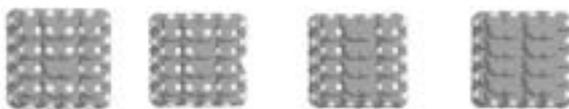


Рис. 7. Фрагменты поверхностных магнитных структур (2×1) на гидрогенизированной поверхности Si(2×1)–H [41, 44]

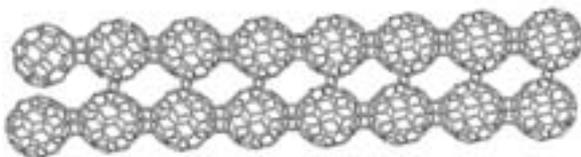


Рис. 8. Олигомер кремниевого фуллерена Si₆₀

Олигомеры, состоящие из небольшого числа молекул, обуславливают рост волокна вширь, при этом толщина волокна изменяется в соответствии с экспериментом дискретным способом и кратна поперечному размеру мономерной молекулы (~1 нм). Рост волокна в длину определяется последующим связыванием олигомеров по всей их длине, иными словами, полимеризацией олигомеров. Представленный на рис. 8 фрагмент отвечает волокну толщиной ~ 10 нм и длиной в два мономерных шага. Вычисления предсказывают необычные магнитные свойства у подобных образований. На сегодняшний день квантово-химический расчет подобной системы с полной оптимизацией геометрии является рекордным.

Список применений вычислительной нанотехнологии к решению задач нанотехнологии и наноматериаловедения можно продолжать еще долго. Мы не ставили перед собой задачу дать исчерпывающий обзор всего диапазона области ее действия, оставляя, например, незатронутой такую важную проблему, как вычислительное конструирование лекарств [49]. Нашей целью было показать, что современная вычислительная нанотехнология, стала эффективным средством производства нанотехнологических процессов.

Заключение

В период, когда организация жизни человеческого общества претерпевает революционные изменения, когда основа жизни, покоящаяся на ресурсах, заменяется покоящейся на знаниях, нанотехнология обеспечивает этот переход, предлагая новую концепцию науки о материалах и технологии. Явления, протекающие в шкале атомных и молекулярных размеров, приводят к самоорганизации материалов и/или их структуры. «Знание-содержащие-материалы», или интеллектуальные материалы, или умные материалы, — вот одна из ближайших действительностей окружающего нас мира в недалеком

будущем. Этот мир мало изучен, он таит в себе много тайн и опасностей [50]; плохо освещены и практически не видны пути, по которым следует в нем перемещаться. И поэтому не будет слишком большим преувеличением сказать, что вычислительная нанотехнология может оказаться той нитью Ариадны, которая уверенно поведет человечество осваивать свое новое наноразмерное будущее.

ЛИТЕРАТУРА

1. Андриевский Р. А. Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д. И. Менделеева), 2002, т. 46, № 5 с. 50.
2. Фейнман Р. Ф. Там же, 2002, т. 46, № 5 с. 4
3. Binning G., Rohrer H., Gerber Ch., Weibel E. Phys. Rev. Lett., 1982, v. 49, p. 57.
4. Лускинович П. Н., Фролов В. Д., Шавыкин А. Е. и др. Письма в ЖЭТФ, 1995, т. 62, с. 868.
5. Sheka E. F., Khavryutchenko V. D., Zayets V. A. Int. J. Quantum Chem., 1996, v. 57, p. 741–755.
6. Sheka E. F., Khavryutchenko V. D., Nikitina E. A. Phys. Low-Dim. Struct., 1996, № 11–12, p. 65–81.
7. Sheka E. F., Khavryutchenko V. D., Nikitina E. A. J. Chem. Vap. Dep., 1996, v. 5, p. 1–12.
8. Galushkin A. I., Luskovich P. N., Nesmeyanov S. S. e. a. J. Brit. Interplanet. Soc., 1994, v. 47, p. 331.
9. Drexler R. T. Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing, and Computations. Palo Alto: Foresight Institute, 1992.
10. Thiel W. In: Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry. Ed. J. Grotendost. Julich: John von Neumann Inst. for Computing, NIC Series, 2000, v. 1, p. 233–255.
11. Dewar M. J. S., Thiel W. J. Am. Chem. Soc., 1977, v. 99, p. 4899.
12. Dewar M. J. S., Zoebisch E. G., Healey E. F., Stewart J. J. P. Ibid., 1985, v. 107, p. 3902.
13. Grebenjuk A. G., Zayets V. A., Gorlov Yu. I. React. Kinet. Catal. Lett., 1993, v. 50, p. 257.
14. Stewart J. J. P. J. Comp.-Aided Mol. Design, 1990, v. 4, p. 1; MOPAC: A General Molecular Orbital Package, QCPE program 455, 1983; QCPE Bull 1983, v. 3, p. 43; Program MOPAC93, Release 2, 1995.
15. Заец В. А. Программа квантово-химических вычислений в *sp*-базисе CLUSTER-Z1. Киев: Ин-т хим. поверхн. АН УССР, 1990.
16. Заец В. А. Программа квантово-химических вычислений в *spd*-базисе CLUSTER-Z2. Киев: Ин-т хим. поверхн. АН УССР, 1990.
17. Берзигяров П. К., Заец В. А., Разумов В. Ф., Шека Е. Ф. МР-ZAVA: параллельный программный комплекс для проведения квантово-химических расчетов в *spd*-базисе. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2000.
18. Берзигяров П. К., Заец В. А., Гинзбург И. Я. и др. NANOPACK: параллельный программный комплекс для проведения квантово-химических расчетов в *sp*- и *spd*-базисе. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2001.
19. Берзигяров П. К., Заец В. А., Гинзбург И. Я. и др. NANOVIBR: параллельный программный комплекс для полумпирических квантово-химических расчетов в *sp*- и *spd*-базисе и расчетов нормальных колебаний. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2001.
20. Siegbahn P. E. M. In: Advances in Chemical Physics: New Methods in Computational Quantum Mechanics. Ed. I. Prigogine. N.Y.: John Wiley & Sons, Inc, 1996, p. 333.
21. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир и Изд-во МГУ, 2001.
22. Murphy R. B., Philipp D. M., Friesner R. A. J. Comput. Chem., 2000, v. 21, p. 1442–1457.
23. Berzigiayrov P. K., Zayets V. A., Ginzburg I. Ya. e. a. TASK Quarterly, 2002, v. 6, p. 233–251.
24. Berzigiayrov P. K., Zayets V. A., Ginzburg I. Ya. e. a. Int. J. Quantum Chem., 2002, v. 88, p. 449–464.
25. Blackford L. S., Choi J., Cleary A. e. a. ScaLAPACK Users' Guide, Society for Industrial and Applied Mathematics. Philadelphia, 1997.
26. Berzigiayrov P. K., Zayets V. A., Ginzburg I. Ya. e. a. In: 5-th Sess. of V. A. Fock School on Quantum Chemistry and Computational Chemistry (Novgorod the Great, 2002). Novgorod: Novgorod State Univ, 2002, p. 58.
27. Khavryutchenko V., Nikitina E., Sheka E. e. a. Phys. Low-Dim. Struct., 1998, № 5/6, p. 1–30.
28. Khavryutchenko V., Nikitina E., Sheka E. e. a. Ibid., 1999, № 9/10, p. 1–24.
29. Nikitina E. A., Khavryutchenko V. D., Sheka E. F. e. a. J. Phys. Chem. A, 1999, v. 103, p. 11355–11365.
30. Nikitina E. A., Khavryutchenko V. D., Sheka E. F. e. a. Composite Interface, 1999, v. 6, p. 3–17.
31. Sheka E., Natkaniec I., Khavryutchenko V. e. a. Physica B, 2000, v. 276–278, p. 244–246.
32. Sheka E., Natkaniec I., Khavryutchenko V. e. a. Phys. Low-Dim. Struct., 2000, № 7/8, p. 127–158.
33. Sheka E., Natkaniec I., Khavryutchenko V. e. a. Ibid., 2000, № 9/10, p. 1–24.
34. Sheka E., Natkaniec I., Khavryutchenko V. e. a. Ibid., 2000, № 9/10, p. 25–50.
35. Khavryutchenko V., Sheka E., Aono M., Huang D. H. Ibid., 1995, № 12, p. 349–361.
36. Khavryutchenko V., Sheka E., Aono M., Huang D. H. Ibid., 1996, № 9–10, p. 15–44.
37. Khavryutchenko V., Sheka E., Aono M., Huang D. H. Ibid., 1996, № 11–12, p. 1–25.
38. Khavryutchenko V., Sheka E., Aono M., Huang D. H. Ibid., 1998, № 3/4, p. 81–106.
39. Khavryutchenko V., Sheka E., Aono M., Huang D. H. In: 7-th Symp. «Nanostructures. Physics and Technology». (St. Petersburg, 1999). S.Pb.: Ioffe Inst., 1999, p. 550–553.
40. Hamers R. J., Tromp R. M., Demuth J. E. Phys. Rev. Lett., 1986, v. 56, p. 1972.
41. Sheka E. F., Nikitina E. A., Zayets V. A. ECOSS21, Malmo, Sweden, 23–28 June, 2002, A2874.
42. Wu Z., Nakayama T., Sakurai M., Aono M. In: I Int. Symp. on Nanoarchitectonics Using Suprainteraction — NASI-1 (Tsukuba, Japan, 2000).
43. Suzuki T., Venkataraman V., Aono M. Ibid.
44. Nikitina E. A., Sheka E. F., Aono M. Phys. Low-Dim. Struct., 2001, № 1/2, p. 31–56.
45. Marsen B., Sattler K. Phys. Rev. B, 1999, v. 60, p. 11593–11598.
46. Шека Е. Ф., Никитина Е. А. Докл. АН, 2001, т. 378, с. 1–6.
47. Шека Е. Ф., Никитина Е. А., Заец В. А., Гинзбург И. Я. Письма в ЖЭТФ, 2001, т. 74, № 3, с. 196–201.
48. Sheka E. F., Zayets V. A., Nikitina E. A., Ginzburg I. Ya. Int. J. Quantum Chem., 2002, v. 88, p. 441–448.
49. Meyer E. F., Swanson S. M., Williams J. A. Pharm. Therapeut., 2000, v. 85, p. 113–121.
50. Шека Е. Ф. Машиностроитель, 2000, № 8, с. 16–22.