

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Факультет математики и информатики
Кафедра информационных и управляющих систем
Направление подготовки 09.04.01 – Информатика и вычислительная техника
Направленность (профиль) образовательной программы: Компьютерное моделирование

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ

Зав. кафедрой

_____ А.В. Бушманов

«_____» _____ 2018 г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

на тему: Компьютерное моделирование ахиральных углеродных нанотрубок

Исполнитель

студент группы 653 ом

(подпись, дата)

Т.В. Халецкая

Руководитель

доцент, канд. физ.-мат. наук

(подпись, дата)

В.В. Еремина

Руководитель научного
содержания программы
магистратуры

профессор, доктор техн. наук

(подпись, дата)

Е.Л. Еремин

Нормоконтроль

инженер кафедры

(подпись, дата)

В.В. Романико

Рецензент

доцент, кафедры АППиЭ

канд. техн. наук

(подпись, дата)

А.Н. Рыбалев

Рецензент

доцент, канд. физ.-мат. наук,
директор НОЦ ФГБОУ ВО

«АмГУ»

(подпись, дата)

Д.В. Фомин

Благовещенск 2018

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Факультет математики и информатики
Кафедра информационных и управляющих систем

УТВЕРЖДАЮ

Зав. кафедрой

_____ А.В. Бушманов

« ____ » _____ 201_ г.

З А Д А Н И Е

К магистерской диссертации студента Халецкой Татьяны Викторовны

1. Тема магистерской диссертации: Компьютерное моделирование ахиральных углеродных нанотрубок

(утверждена приказом от 23.04.2018 № 914-уч)

2. Срок сдачи студентом законченной работы: ____ . ____ . 2018.

3. Исходные данные к магистерской диссертации: отчёт о прохождении преддипломной практики.

4. Содержание магистерской диссертации: описание предметной области, разработка математических моделей и алгоритмов, программная реализация, решение задачи.

5. Перечень материалов приложения: нет.

6. Дата выдачи задания: ____ . ____ . 2018.

Руководитель магистерской работы Еремина Виктория Владимировна, доцент,
канд. физ.-мат. наук

Задание принял к исполнению ____ . ____ . 201_ г. _____ Т.В. Халецкая

РЕФЕРАТ

Магистерская диссертация содержит 81 с., 25 рисунков, 2 таблицы, 43 источника.

НАНОСТРУКТУРЫ, УГЛЕРОДНАЯ НАНОТРУБКА, АХИРАЛЬНОСТЬ, НАНОТРУБКА ТИПА «ЗИГЗАГ», НАНОТРУБКА ТИПА «КРЕСЛО», АТОМНЫЙ КАРКАС, ПРОГРАММНОЕ СРЕДСТВО, ВИЗУАЛИЗАЦИЯ

Среди распространенных наноматериалов выделяются углеродные наноматериалы, такие как углеродные нанотрубки. С каждым годом растет число применений углеродных наноматериалов, разрабатываются новые программные средства для создания моделей наноструктур и их изучения. Несмотря на большое количество экспериментальных работ по определению строения нанообъектов в полной мере не хватает. Поэтому активно ведутся разнообразные теоретические работы в области описания и моделирования строения и различных свойств наноструктур. Исследование и моделирование наноструктур требует визуализации атомов, пространственного распределения электронной плотности и молекулярных орбиталей в этих структурах.

В данной работе приведены алгоритмы графического вывода атомного каркаса наноструктур и их программные реализации, созданные в пакете MATLAB.

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>		
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>			
<i>Разраб.</i>		<i>Т.В. Халецкая</i>			<i>Лит.</i>	<i>Лист</i>	<i>Листов</i>
<i>Проверил</i>		<i>В.В. Еремينا</i>				3	78
<i>Н. контр.</i>		<i>В.В. Романико</i>			<i>АмГУ кафедра ИУС</i>		
<i>Зав. каф..</i>		<i>А.В. Бушманов</i>					
<i>КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АХИРАЛЬНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК</i>							

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	7
1 Общая характеристика углеродных наноматериалов	9
1.1 Классификация углеродных наноматериалов	9
1.2 Структура углеродных нанотрубок	18
2 Моделирование структуры ахиральных нанотрубок	25
2.1 Математическое моделирование атомного каркаса наноматериалов	25
2.2 Математические модели нанотрубки типа «зигзаг»	34
2.3 Математические модели нанотрубки типа «кресло»	37
3 Разработка программы визуализации углеродных нанотрубок	45
3.1 Обзор существующих программных продуктов	45
3.2 Характеристика среды разработки программы	51
3.3 Структура и возможности программного продукта	56
Заключение	76
Библиографический список	77

						Лист
						4
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

ВКР.165638.09.04.01.ПЗ

НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ

В магистерской диссертации использованы ссылки на следующие стандарты и нормативные документы:

ГОСТ 19.001-77 ЕСПД	Общие положения;
ГОСТ 19.004-80 ЕСПД	Термины и определения;
ГОСТ 19.101-77 ЕСПД	Виды программ и программных документов;
ГОСТ 19.102-77 ЕСПД	Стадии разработки;
ГОСТ 19.103-77 ЕСПД	Обозначение программ и программных документов;
ГОСТ 19.104-78 ЕСПД	Основные надписи;
ГОСТ 19.105-78 ЕСПД	Общие требования к программным документам;
ГОСТ 19.106-78 ЕСПД	Требования к программным документам, выполненным печатным способом;
ГОСТ 19.401-78 ЕСПД	Текст программы. Требования к содержанию и оформлению;
ГОСТ 19.402-78 ЕСПД	Описание программы;
ГОСТ 24.103-84	Автоматизированные системы управления. Основные положения;
ГОСТ 24.104-85	Автоматизированные системы управления. Общие требования;
ГОСТ 34.201-89	Виды, комплектность и обозначение документов при создании автоматизированных систем.

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

АС – автоматизированная система;
БД – база данных;
МУНТ – многостенная углеродная нанотрубка;
НСМ – наноструктурные материалы;
НТ – нанотрубка;
ОУНТ – одностенная углеродная нанотрубка;
ПК – персональный компьютер;
ПО – программное обеспечение;
ППП – пакет прикладных программ;
ПС – программное средство;
СТМ – структура трубки под микроскопом;
СУБД – система управления базами данных;
УНМ – углеродные наноматериалы;
УНТ – углеродная нанотрубка;
ЭВМ – электронно-вычислительная машина;
GUI – graphical user interface.

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		6

ВВЕДЕНИЕ

В многообразии новых материалов особое место занимают материалы, имеющие наномасштабную структуру (наноматериалы) и материалы, наполненные наноструктурными частицами нано- и микромасштабов (нанокомпозиты). Этим материалам, как правило, присущи высокие значения характеристик деформирования, прочности и трещиностойкости, что обуславливает их перспективность для различных применений в промышленности.

Среди распространенных наноматериалов выделяются углеродные наноматериалы, такие как углеродные нанотрубки. С каждым годом растет число применений углеродных наноматериалов, разрабатываются новые программные средства для создания моделей наноструктур и их изучения. Несмотря на большое количество экспериментальных работ по определению строения нанообъектов в полной мере не хватает. Поэтому активно ведутся разнообразные теоретические работы в области описания и моделирования строения и различных свойств наноструктур.

Актуальность выбранной темы определена тем, что потребность в новых материалах с новыми свойствами привела современную науку к необходимости исследования электронно-атомного строения наноматериалов, экспериментальное изучение размеров которых требует дорогостоящей высокоточной аппаратуры. В свою очередь моделирование в наномасштабе того или иного материала может быть выполнена за счет визуализации положений его атомных узлов.

В исследовании структуры и свойств объектов нанометрового масштаба все большее распространение находит компьютерная визуализация, которую принято называть научной визуализацией. Под научной визуализацией понимается создание графических образов, в максимально информативной форме воспроизводящих значимые аспекты исследуемого процесса или явления.

Целью работы является разработка алгоритмов визуализации трехмерной модели строения ахиральных углеродных нанотрубок.

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		7

В ходе проведенного исследования были рассмотрены следующие задачи:

- изучение пространственного строения углеродных наноматериалов;
- разработка математических моделей и алгоритмов визуализации атомных каркасов ахиральных углеродных нанотрубок;
- разработка комплекса программ, существенно ускоряющего графический вывод ахиральных углеродных нанотрубок.

Достижения в разработке и изготовлении наноструктур различного назначения в наибольшей степени определяются уровнем развития технологий, которые позволяют с атомной точностью получать наноструктуры необходимой конфигурации и размерности. С каждым годом разрабатываются всё новые программные средства для создания моделей наноструктур и их изучения.

Научная новизна основных результатов работы состоит в следующем: разработаны модели и алгоритмы расчета атомного каркаса углеродных наноструктур, позволяющие с единых позиций визуализировать данные структуры, с целью прогнозирования свойств наноструктур.

Практическая значимость полученных результатов заключается в том что, предлагаемые в данной работе математические модели, вычислительные алгоритмы и разработанное программное средство позволяют исследовать строение и свойства ахиральных углеродных нанотрубок с известным геометрическим законом строения атомной решетки.

Защищаемые положения:

- 1) алгоритм определения координат атомного каркаса ахиральной нанотрубки различной конфигурации;
- 2) алгоритм определения физических параметров нанотрубки заданной структуры;
- 3) комплекс программ автоматизирующих расчет структурных параметров и визуализацию 3D моделей атомного каркаса углеродных наноструктур.

Основные результаты исследования опубликованы в трех печатных работах [20, 41, 42].

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		8

1 ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

1.1 Классификация углеродных наноматериалов

На сегодняшний день исследование и использование наноразмерных предметов признано первенствующим курсом научно-технического прогресса, посредством которого находится в зависимости последующее формирование наиболее различных областей жизнедеятельности нынешнего сообщества – экономики, медицины, научных исследований, информативных технологий, экологии, оборонной индустрии и т. д. С формированием нанотехнологий возникает большое число материалов, включающих наноразмерные (<100 нм) частицы. В настоящее время размер промышленного изготовления наноматериалов в цивилизованных государствах доходит до нескольких тысяч тонн в год.

Само представление о наноматериалах и веществах в наносостоянии было сформулировано в 1959 г., когда Нобелевский лауреат Р. Фейнман в своей лекции подчеркнул важность изучения малоразмерных структур, основываясь на общепринятых положениях о строении вещества. В 1974 г. японский ученый Н. Танигучи впервые использовал термин «нанотехнология». В 1981 г. Г. Глейтер применительно к металлическим материалам ввел термин «нанокристаллические материалы», вслед за которыми появились определения «наноструктурный», «нанофазный», «нанокомпозитный» [1].

Итак, наноматериалы – материалы, содержащие структурные компоненты, геометрические размеры которых хотя бы в одном измерении не превышают 100 нм, и обладающие качественно новыми свойствами, многофункциональными и эксплуатационными характеристиками.

Согласно рекомендации 7-й Международной конференции по нанотехнологиям (Висбаден, 2004 г.), выделяют следующие типы наноматериалов:

- нанопористые структуры;
- наночастицы;
- нанотрубки и нановолокна;
- нанодисперсии (коллоиды);

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		9

- наноструктурированные поверхности и пленки;
- нанокристаллы и нанокластеры.

На сегодняшний день отсутствует единая терминология и классификация наноматериалов в зависимости от размера частиц, но с недавних пор стали различать геометрическую и физическую размерность наночастиц.

Наноматериалы можно подразделить на четыре группы (рисунок 1).



Рисунок 1 – Классификация наноматериалов

Первая группа включает материалы в виде твердых тел, размеры которых в одном, двух или трех пространственных координатах не превышают 100

нм. К подобным материалам можно причислить наноразмерные частицы (нанопорошки), нанопроволоки и нановолокна, очень тонкие пленки (толщиной менее 100 нм), нанотрубки и т. п. Такого рода материалы могут содержать от одного структурного компонента или кристаллита (для частиц порошка) до нескольких их слоев (для пленки). На этом основании первую категорию классифицируют как наноматериалы с малым числом структурных компонентов или наноматериалы в виде изделий.

Вторая группа содержит в себе материалы в виде малогабаритных изделий с определяющей величиной в диапазоне от 1 мкм до 1 мм. Как правило к ним относят проволоки, ленты, фольги. Подобные материалы можно классифицировать как наноматериалы с большим количеством структурных компонентов (кристаллитов) или наноматериалы в виде изделий.

Третья группа включает в себя массивные (или объемные) наноматериалы с размерами изделий из них в макродиапазоне (более нескольких миллиметров). Подобные материалы состоят из очень большого количества наноразмерных элементов (кристаллитов) и, по сути, считаются поликристаллическими материалами с размером зерна 1-100 нм. Таким образом, третью группу наноматериалов можно разбить на два класса.

К первому классу относят однофазные материалы (в соотношении с терминологией – микроструктурно однородные материалы), структура и/или химический состав которых меняется согласно размеру материала только лишь на атомном уровне. Их структура обычно пребывает в состоянии отдаленном от равновесия. К подобным материалам принадлежат, к примеру, стекла, гели, пересыщенные твердые растворы.

К другому классу можно причислить микроструктурно неоднородные материалы, состоящие из наноразмерных элементов (кристаллитов, блоков) с различной структурой и/или составом. К ним относят многофазные материалы, например, на основе сложных металлических сплавов.

Вторая и третья группы наноматериалов входят в более узкие определения нанокристаллических или нанофазных материалов.

К четвертой группе принадлежат композиционные материалы, содержащие в своем составе элементы из наноматериалов. В качестве элементов выступают наноматериалы, относящиеся к первой группе (композиты с наночастицами и/или нановолокнами, изделия с измененным ионной имплантацией поверхностным слоем или тонкой пленкой) и второй группе (например, композиты, упрочненные волокнами и/или частицами с наноструктурой, материалы с модифицированным наноструктурным поверхностным слоем или покрытием). Кроме того, можно отметить композиционные материалы со сложным использованием наноконпонентов [24].

Зачастую наноматериалы систематизируют согласно природе (составу) нанофазы. На сегодняшний день на основании подобного признака выделяют наноматериалы:

- углеродные (фуллерены, нанотрубки);
- полимерные – нанокомпозиты и древовидные (дендритные) структуры на полимерной основе, органические и неорганические нанопленки;
- металлические (наночастицы, нанопорошки, нанокристаллы, нанопленки металлов, их соединений, сплавов);
- на керамической основе (сложные соединения, нанокомпозиты).

Следует указать на то, что отнесение к третьему типу всех материалов, содержащих атомы металлов, является спорным: логичнее было бы выделить по составу нанофазы отдельные типы нанометаллов и соединений металлов, так как и по составу, и по свойствам они сильно отличаются [11].

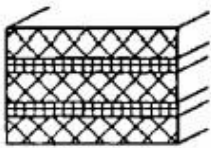

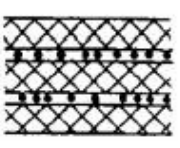
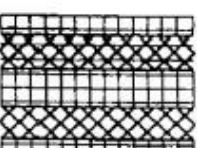

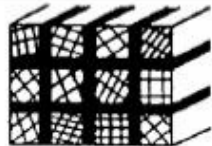
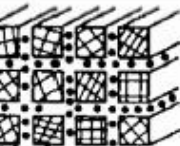
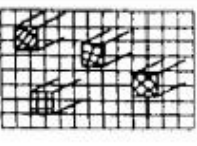
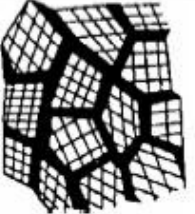
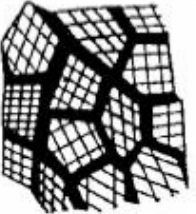
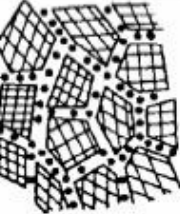
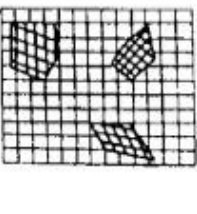
Качества наноматериалов в существенной степени обуславливаются характером распределения, формой и химическим составом кристаллитов (наноразмерных элементов), из которых они состоят.

На основании этого принято классифицировать структуры наноматериалов согласно данным показателям (таблица 1).

По форме кристаллитов наноматериалы можно разбить на слоистые (пластинчатые), волокнистые (столбчатые) и равноосные. Безусловно, что тол-

щина слоя, диаметр волокна и размер зерна в данном случае принимают значения около 100 нм и менее. Отталкиваясь от отличительных черт химического состава кристаллитов и их границ, выделяют четыре категории наноматериалов.

Таблица 1 – Основные типы структуры наноматериалов

Характер распределения	кристаллитное			матричное
	состав кристаллитов и границ одинаковый	состав кристаллитов различен при одинаковом составе границ	состав кристаллитов и границ различный	
Химический состав				кристаллиты распределены в матрице другого состава
Форма кристаллитов: Слоистая				
Волокнистая				
Равноосная				

В первую категорию входят материалы, у которых химический состав кристаллитов и границ раздела одинаковы. Их также еще именуют однофазными. Примерами подобных материалов могут служить чистые металлы с нанокристаллической равноосной структурой, а также слоистые поликристаллические полимеры.

Во вторую группу включают материалы, у которых состав кристаллитов различается, однако границы считаются схожими по своему химическому составу.

Третья категория содержит наноматериалы, у которых как кристаллиты, так и границы имеют разный химический состав.

К четвертой категории относятся наноматериалы, в которых наноразмерные выделения (частицы, волокна, слои) распределены в матрице, обладающей другим химическим составом. К данной категории принадлежат дисперсно-упрочненные материалы.

К наноматериалам, применяемым в той или иной сфере, предъявляют разнообразные требования. К примеру, материалы, необходимые для радиоэлектроники, обязаны, в первую очередь, обуславливаться требуемыми физическими свойствами и гарантировать миниатюризацию приборов. Наноматериалы конструкционного направления предусмотрены чаще всего для производства массивных изделий, и им дают оценку степенью механических свойств [43].

Из всего многообразия наноструктур на сегодняшний день наибольший интерес вызывают углеродные нанотрубки, обладающие уникальными упругими и прочностными свойствами. Углерод в Периодической системе Менделеева расположен в четвертой группе, атомный номер 6, атомная масса 12,011.

Электронные орбитали атома углерода могут обладать разной геометрией, в зависимости от уровня гибридизации его электронных орбиталей. Существует три ключевых геометрии атома углерода:

– тетраэдрическая геометрия, образуется при смешении одного s- и трех p-электронов (sp^3 -гибридизация). Атом углерода расположен в центре тетраэдра и связан четырьмя эквивалентными σ -связями с атомами углерода или иными в вершинах тетраэдра. К подобной геометрии атома углерода относятся аллотропные модификации углерода алмаз и лонсдейлит. Данной гибридизацией обладает углерод, к примеру, в метане и иных углеводородах.

– тригональная геометрия, образуется при смешении одной s- и двух p-электронных орбиталей (sp^2 -гибридизация). Атом углерода обладает тремя равноценными σ -связями, находящимися в одной плоскости под углом 120°

друг к другу. Не участвующая в гибридизации р-орбиталь, расположенная перпендикулярно плоскости σ -связей, предназначена для образования π -связи с другими атомами. Подобная геометрия углерода целесообразна для графита, фенола и др.

– дигональная геометрия, получается при смешении одного s- и одного р-электронов (sp-гибридизация). При этом два электронных облака вытянуты вдоль одного направления и имеют вид несимметричных гантелей. Два других р-электрона дают π -связи. Углерод с подобной геометрией атома образует определенную аллотропную модификацию – карбин.

Синтез (1985 г.) углеродных фуллеренов (каркасных кластеров углерода C_n) и нанотрубок (1991 г.) – одно- или многослойных цилиндров, стенки которых образованы гексагонами C_6 – открыл современный этап в развитии представлений об аллотропии углерода и инициировал постановку многочисленных экспериментальных и теоретических работ по поиску и получению новых наноразмерных форм углерода. Основные сведения о наиболее известных нано-аллотропах углерода и их характеристические размеры представлены в таблице 2.

Отмеченные в таблице фуллерены представляют собой замкнутые молекулы углерода, в которых все атомы расположены в вершинах правильных шестиугольников либо пятиугольников, образующих поверхность сферы либо сфероида.

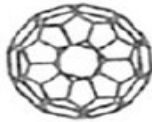
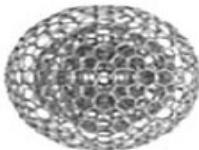
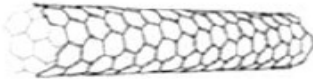
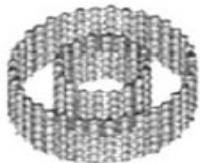

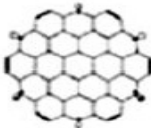
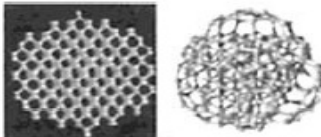
В 1991 г. японским ученым Сумио Иинджимой при синтезе фуллеренов было выявлено ещё несколько типов новых структур. Наиболее уникальными оказались длинные полые волокна, состоящие из графитовых слоев фуллереноподобной конструкции с диаметрами от одного до нескольких десятков нанометров, которые впоследствии были названы углеродными нанотрубками (далее УНТ). Отношение длины к диаметру в УНТ составляет 1000, поэтому их расценивают как квазиодномерные структуры.

Углеродные нанотрубки – представляют собой молекулярные соеди-

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		15

нения, относящиеся к классу аллотропных модификаций углерода и представляющие собой протяженные цилиндрические структуры диаметром от одного до нескольких десятков нанометров и длиной от одного до нескольких микрометров.

Таблица 2 – Характеристические размеры основных наноаллотропов углерода

Тип наноаллотропов	Атомная модель	Характеристический размер
Фуллерены		Минимальный фуллерен C ₂₀ Наиболее стабильный фуллерен C ₆₀
Онионы		Внешний диаметр 10–100 нм, внутренний диаметр 0.7–1.0 нм (~ C ₆₀)
Нанотрубки		Диаметры: типичные 1–10 нм, интервал: от 0.4 до 100 нм. Длина: типичная 50–100 нм, интервал 1 нм – несколько мкм
Многостенные нанотрубки		Длина 10–100 нм, внешний диаметр 2.5–30 нм
Связки нанотрубок		Обычно 10–100 (до тысячи) нанотрубок в связке. Длина – до нескольких десятков мкм
Графеновая сетка		10–15 нм
Наноалмазы		От 1.8 до 4–5 нм

УНТ могут состоять из одной или нескольких вставленных друг в друга или свернутых в трубку слоев, каждый из которых представляет гексагональную сетку графита (графен). Основу сетки составляют шестиугольники с расположенными в вершинах углов атомами углерода (рисунок 2). Во всех случаях расстояние между слоями составляет 0,34 нм, как

в графите. Верхние концы трубок зачастую закрыты полусферическими крышечками, каждый слой которых составлен из шести- и пятиугольников.

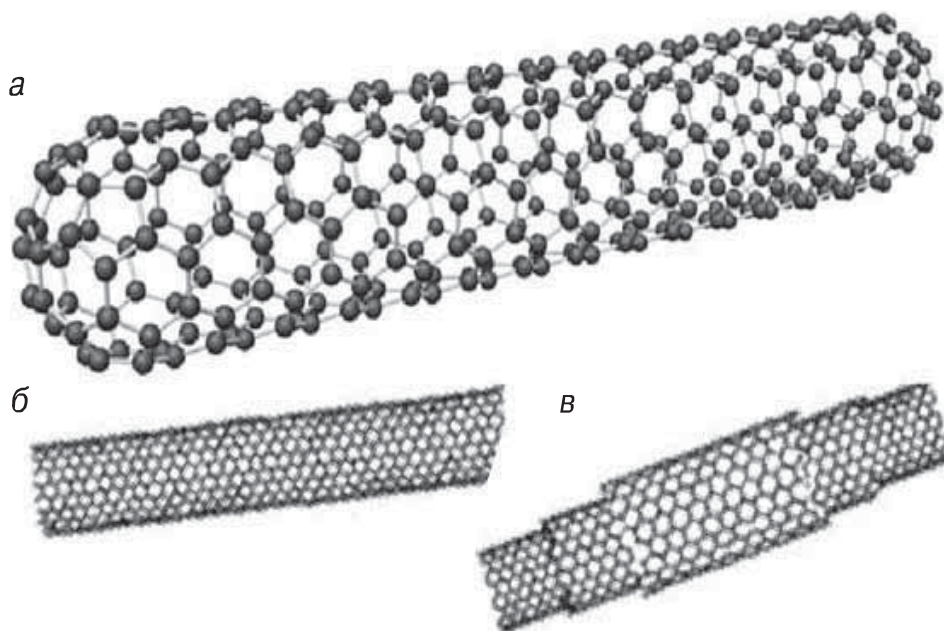


Рисунок 2 – Структуры углеродных нанотрубок: идеальная целая трубка (а); фрагменты одностенной (б) и многостенной (в) нанотрубок

Таким образом, нанотрубки классифицируют (рисунок 2):

а) по способу сворачивания графитовой плоскости на прямые (ахиральные) нанотрубки («кресло» или «зубчатые»), зигзагообразные («зигзаг») и спиральные (хиральные);

б) по числу «слоев» – на одностенные и многостенные.

За счет изменения хиральности углеродных нанотрубок т. е. направления закручивания их решетки относительно продольной оси, возможно в определенной степени управлять свойствами нанотрубок. Углеродные нанотрубки получают как с металлическим типом проводимости, так и с заданной шириной запрещенной зоны.

Одностенные нанотрубки (индивидуальные, в небольших сборках или в сетях) являются своего рода миниатюрными датчиками с ультравысокой чувствительностью используемые для обнаружения молекул в газовой среде или в растворах – при адсорбции молекул на поверхности нанотрубки ее

электрическое сопротивление меняется. Подобные нанодатчики могут использоваться для мониторинга окружающей среды, в военных, а также медицинских целях и биотехнологии [24].

Более подробно строение углеродных нанотрубок будет рассмотрено в следующих пунктах.

Углеродные нанотрубки не растворяются и довольно трудно диспергируются в растворителях, именно это составляет большую трудность для их модифицирования. Подходы, позволяющие модифицировать нанотрубки для их практического использования, можно разделить на три группы:

- 1) модифицирование дефектов;
- 2) нековалентная (супрамолекулярная) модификация;
- 3) ковалентная модификация боковых стенок.

Возможности использования нанотрубок очень обширны и разумеется определяются их неповторимыми механическими и физико-химическими особенностями. Данные структуры могут являться основой сверхпрочных нитей, композитных материалов, наноподвесов, транзисторов, нанопроводов, топливных элементов, прозрачных проводящих поверхностей, дисплеев, светодиодов и др. Они могут быть использованы в изготовлении капсул для активных молекул, нанопипеток, емкостей для хранения металлов и газов. Набор нанотрубок с заданным внутренним диаметром может послужить основой для создания молекулярных сит высокой селективности и газопроницаемости. Композиционные материалы с применением углеродных нанотрубок в последствие станут иметь важнейшее значение при производстве светозащитных экранов.

1.2 Структура углеродных нанотрубок

Как уже было ранее замечено, из всего многообразия наноструктур в настоящее время наибольший интерес вызывают углеродные нанотрубки, имеющие уникальные упругие и прочностные свойства.

При формировании УНТ самым важным и основным является то, каким

образом расположена исходная графитовая плоскость по отношению к оси будущей нанотрубки. Еще одним важным критерием при классификации является число слоев нанотрубки и их взаимная ориентация [17].

Углеродные нанотрубки классифицируются кроме того согласно типам хиральности и по количеству слоев (однослойные и многослойные).

Хиральность – геометрическое свойство жесткого объекта (пространственной структуры) быть не совместимым со своим зеркальным отображением в идеальном плоском зеркале [5]. Таким образом, нехиральные нанотрубки симметричны относительно плоскостей, проходящих вдоль нанотрубки по центру, и симметричны относительно плоскости, разделяющей нанотрубку пополам. Хиральность нанотрубок принято обозначать набором символов (m, n), они указывают координаты шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости должен совпадать с шестиугольником, находящимся в начале координат.

Итак, по значению параметров (n, m) различают:

1) прямые (ахиральные) нанотрубки:

– «кресло» или «зубчатые» (armchair) $n = m$;

– зигзагообразные (zigzag) $m = 0$ или $n = 0$;

2) спиральные (хиральные) нанотрубки.

Существует еще один способ обозначения хиральности. Он заключается в указании угла α между направлением сворачивания нанотрубки и направлением, в котором соседние шестиугольники имеют общую сторону. Однако в подобном случае для полного описания геометрии нанотрубки необходимо обязательно указать её диаметр [2]. Индексы хиральности однослойной нанотрубки (m, n) однозначным образом определяют её диаметр D. Указанная связь имеет следующий вид:

$$D = \frac{\sqrt{3}d_0}{\pi} \cdot \sqrt{m^2 + n^2 + mn}, \quad (1)$$

где $d_0 = 0,142$ нм – расстояние между соседними атомами углерода в

графитовой плоскости.

Связь между индексами хиральности (m, n) и углом α даётся соотношением:

$$\sin \alpha = \frac{m\sqrt{3}}{2\sqrt{m^2 + n^2 + mn}} \quad (2)$$

Среди различных всевозможных направлений сворачивания нанотрубок выделяются те, для которых совмещение шестиугольника (m, n) с началом координат не требует искажения его структуры. Этим направлениям соответствуют, в частности, углы $\alpha = 0$ (armchair конфигурация) и $\alpha = 30^\circ$ (zigzag конфигурация). Указанные конфигурации отвечают хиральностям ($m, 0$) и ($2m, n$) соответственно.

Особое место среди однослойных нанотрубок занимают так называемые armchair нанотрубки или нанотрубки с хиральностью (10,10). В нанотрубках такого типа две из C–C связей, входящих в состав каждого шестичленного кольца, ориентированы параллельно продольной оси трубки.

По внешнему виду поперечного среза, нанотрубки ($n, 0$), как уже было ранее сказано, называют нанотрубками типа «зигзаг» или зигзагообразные (рисунок 3 а), а нанотрубки (n, n) нанотрубками типа «кресло» или «зубчатые» (рисунок 3 б). Элементарная ячейка нанотрубки выделена черным цветом [20].

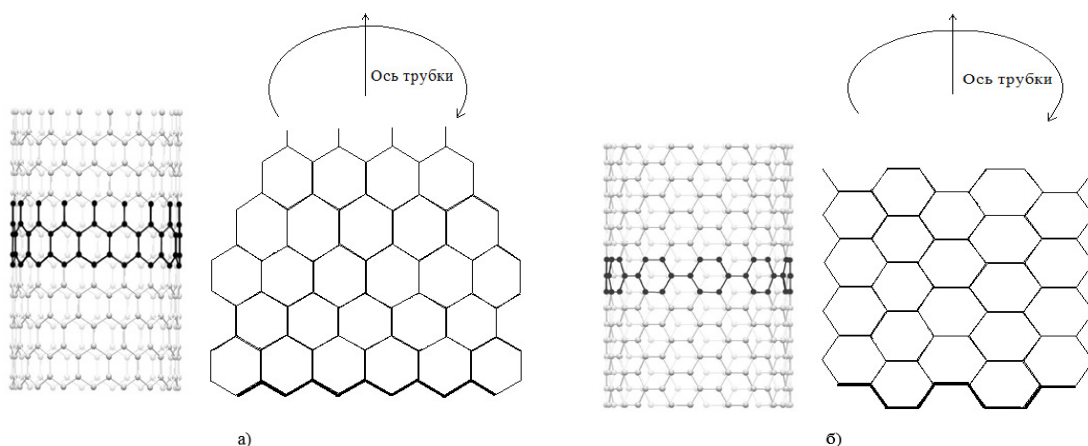


Рисунок 3 – Строение ахиральных углеродных нанотрубок
а) типа «зигзаг», б) типа «кресло»

Как следует из определения, основная классификация нанотрубок проводится по способу сворачивания графитовой плоскости. Этот способ сворачивания определяется двумя числами n и m , задающими разложение направления сворачивания на вектора трансляции графитовой решётки.

Симметричные нанотрубки типа «zigzag» и «armchair» представляются векторами $(n, 0)$ и (n, n) соответственно (рисунок 4).

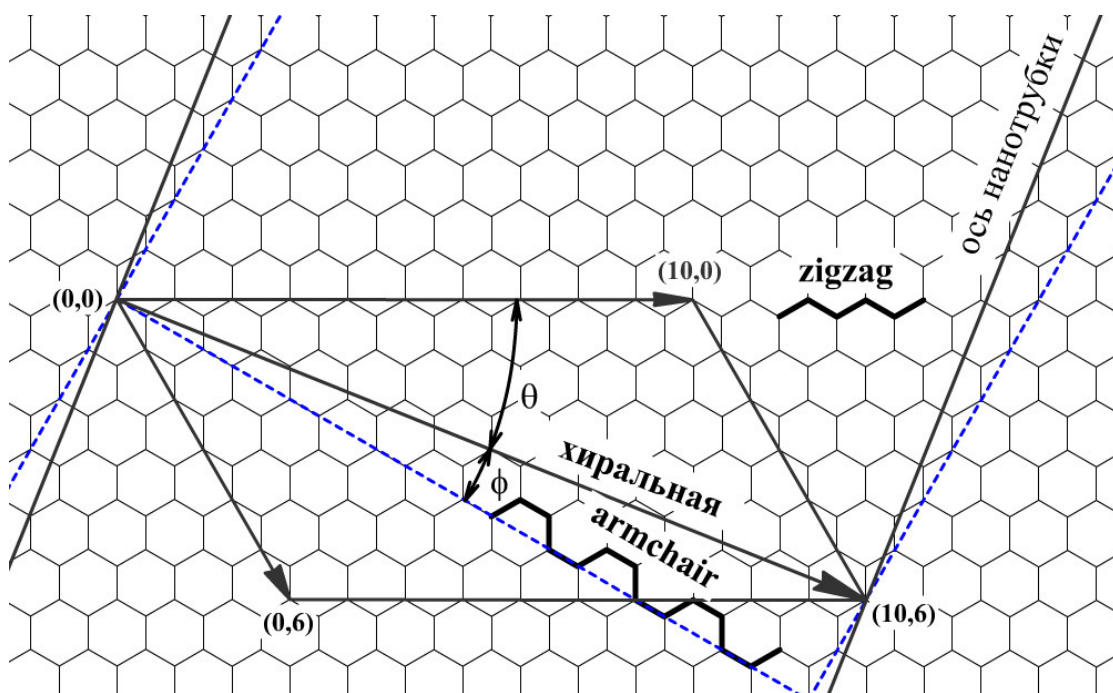


Рисунок 4 – Схематическое изображение атомной структуры графеновой плоскости. Способы образования однослойной нанотрубки

При зеркальном отражении (n, m) нанотрубка переходит в (m, n) нанотрубку, поэтому получается, что трубка общего вида зеркально несимметрична. Прямые же нанотрубки либо переходят в себя при зеркальном отражении (конфигурация «кресло»), либо переходят в себя с точностью до поворота.

Наиболее простым вариантом описания углеродной нанотрубки (УНТ) является вектор, который соединяет два атома на графитовом листе. Цилиндр при сворачивании данного листа приобретает такую форму, при которой происходит совмещение начала и конца подобного вектора. Этот вектор можно выразить через базисные векторы элементарной ячейки графенового листа $C =$

$na_1 + ma_2$, при этом принято, что $n \geq m$. Каждая пара чисел (n, m) представляет возможную структуру нанотрубки (рисунок 5).

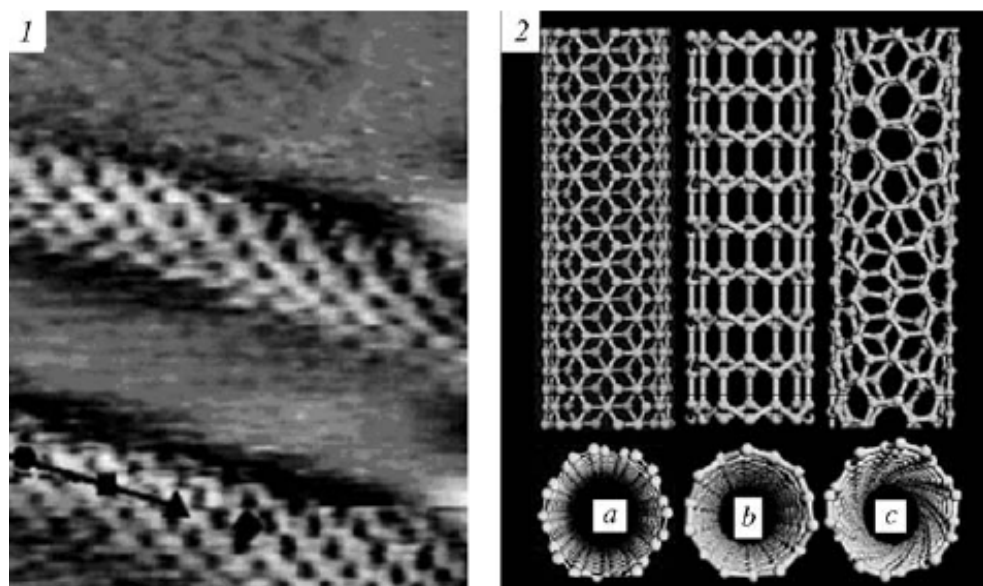


Рисунок 5 – СТМ изображение атомной структуры углеродных нанотрубок (1) и атомные модели основных конфигураций трубок (2):
a – armchair, b – zigzag, c – хиральные НТ

Выделяют также металлические и полупроводниковые нанотрубки. Металлические нанотрубки обладают уникальными возможностями, они проводят электрический ток даже при абсолютном нуле температур, в то время как проводимость полупроводниковых трубок равна нулю при абсолютном нуле и возрастает при повышении температуры. Говоря техническим языком, у полупроводниковых трубок имеется энергетическая щель на поверхности Ферми. Трубка считается металлической, если $(n-m)$, делённое на 3, даёт целое число. Например, металлическими являются все трубки, имеющие зубчатую структуру (типа «кресло»).

Необходимо указать, что вышесказанное относится только к простейшим однослойным нанотрубкам. В реальных же ситуациях трубки зачастую получают многослойными, то есть включают в себя несколько однослойных нанотрубок, которые как бы вложены одна в другую (так называемые «матрешки» (russian dolls)).

Вообще многослойные нанотрубки отличаются от однослойных существенным многообразием форм и конфигураций. Многообразие структур выражается как в их продольном, так и в поперечном направлении.

Существующие разновидности поперечной структуры многослойных нанотрубок представлены на рисунке 6 [13]. Структура типа «русской матрешки» (рисунок 6а) представляет собой совокупность коаксиально вложенных друг в друга однослойных цилиндрических нанотрубок.

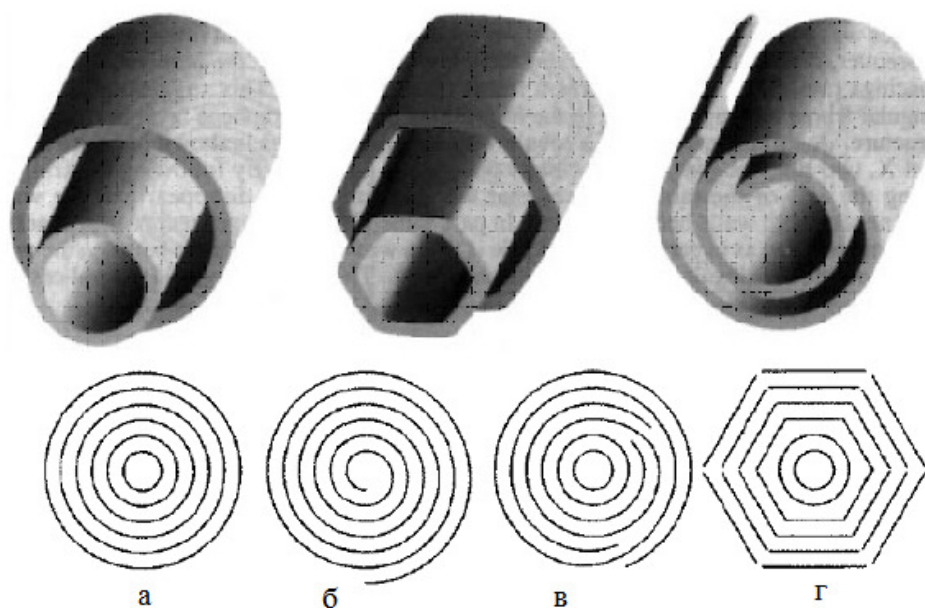


Рисунок 6 – Схематичное изображение наиболее распространенных структур многослойных нанотрубок

а) «русская матрешка», б) свиток, в) папье-маше, г) гранная форма

Как видно из рисунка, внутреннее пространство идеальной структуры типа «матрешка» недоступно для проникновения газообразного или жидкого вещества. Еще одна разновидность структуры многослойной нанотрубки, продемонстрирована на рисунке 6б. Она представляет собой единую графитовую плоскость свиток. В данном случае внутреннее пространство нанотрубки оказывается доступным для проникновения жидких либо газообразных веществ. И наконец, последняя из указанных модификаций (рисунок 6в) предполагает собой многослойную цилиндрическую структуру, которая составлена из небольших графитовых фрагментов и похожа на папье-маше. Подобная

структура обладает существенным внутренним размером, доступным для проникновения разнообразных веществ, и является достаточно привлекательной с относительно сорбционных характеристик. Для всех выше указанных структур определено расстояние между соседними графитовыми слоями, близкое к величине 0,34 нм, присущей расстоянию между соседними плоскостями кристаллического графита.

В многослойных нанотрубках число слоев чаще всего не превышает нескольких десятков, а расстояния между соседними слоями близки к межслоевому расстоянию в графите (0,34 нм), таким образом, минимальный диаметр нанотрубок составляет около 0,7 нм (рисунок 7). Соответственно диаметр второго и последующих концентрических атомных слоев определяется диаметром первого внутреннего слоя.

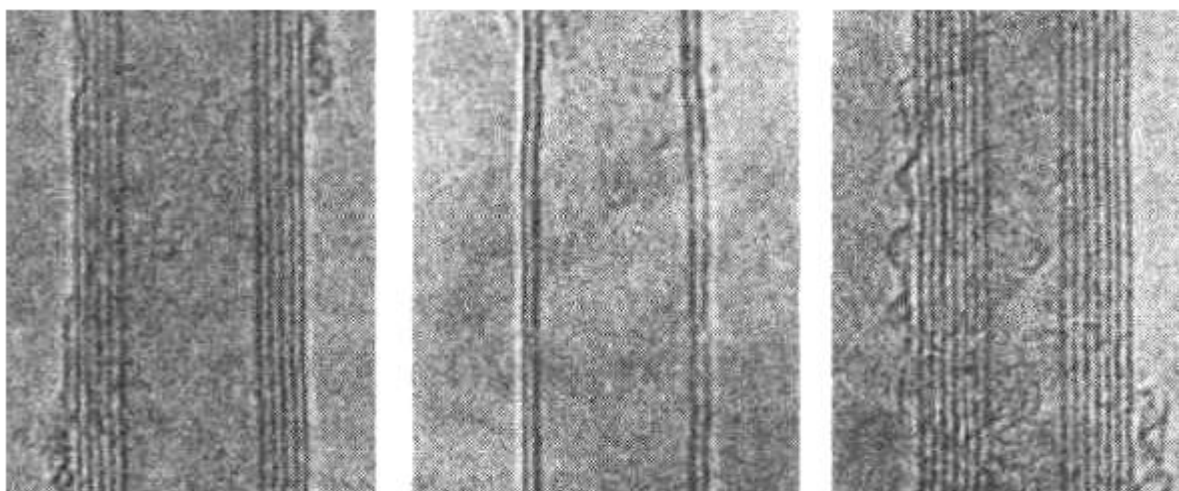


Рисунок 7 – Фрагменты многослойных нанотрубок

В качестве концевых структур нанотрубок можно указать половинки фуллеренов, то есть углеродные конусы или «шапочки» иной морфологии. Нанотрубки также могут быть как изолированными, так и в виде «связок» (или «жгутов»), которые объединяют сотни отдельных трубок, взаимодействующих за счет сил Ван-дер-Ваальса.

2 МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ АХИРАЛЬНЫХ НАНОТРУБОК

2.1 Математическое моделирование атомного каркаса наноматериалов

Роль вычислительной нанотехнологии весьма важна и на сегодняшний день довольно актуально с точки зрения создания прототипов наноматериалов, устройств, систем и разнообразных приложений. Однако вычислительная нанотехнология может применяться не только для понимания и описания характеристик системы, которая может быть получена экспериментальным путем, но также и прогнозировать свойства новых материалов, в связи с тем, что между структурными, механическими, химическими и электрическими свойствами в наноразмерной области имеется довольно сильная взаимосвязь [28].

На сегодняшний день вычислительная нанотехнология наравне с теоретическими разработками и экспериментальными исследованиями представляет собой самостоятельный и довольно эффективный метод познания закономерностей «наномира». В свою очередь она также включает в себя фундаментальные знания и опытные данные. Вследствие быстрого развития современного мира, происходит масштабное и глобальное развитие компьютерной техники, а также средств программного обеспечения, тем самым базой вычислительной нанотехнологии начинает становиться компьютерное моделирование наносистем.

Компьютерные (вычислительные) эксперименты дают возможность просто и моментально изучать разнообразие структуры, при необходимости выделяя структуры, имеющие наглядные изъяны и недостатки. При проектировании наносистем может помочь любая информация, даже если она весьма скромная и сама модель обладает слабой прогнозируемой мощностью.

Еще с середины прошлого столетия стали вестись различного рода работы по фундаментальным исследованиям методов измерения, обработки и моделирования поведения вещества на атомно-молекулярном уровне.

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		25

В настоящее время работа в данном направлении получили бурное продолжение, и достигла довольно внушительных объемов.

В отличие от объектов макро-уровня, объекты на атомно-молекулярном наноуровне требуют их дискретного представления. Вещество в таком масштабе представляет собой совокупность атомов (молекул) или наноструктуру. Исследования наноструктур нуждаются в разработке новых подходов, а также методов. Результаты подобных исследований даже уже на сегодняшний день используются на практике [16].

В частности, выделяются три направления исследований:

- 1) создание новых материалов (сверхлегких и на порядок более прочных, чем используемые на сегодняшний день конструкционные материалы);
- 2) разработка обрабатывающих и запоминающих информацию устройств;
- 3) конструирование микророботов (величиной с биологическую клетку).

Исследования в указанных выше направлениях нуждаются не только в физическом и математическом моделировании, но и в подробном представлении наноструктуры в пространстве. На сегодняшний день производятся не только экспериментальные работы по исследованию физических качеств наноструктурно и работы по математическому (численному) моделированию их качеств [19].

Так как современный мир открывает все больший доступ к высокочисленным и масштабным вычислительным мощностям, тем самым математическое моделирование поведения наноструктур приобретает все большее распространение среди исследователей всего мира.

Современные суперкомпьютеры дают возможность проводить моделирование наноструктур с количеством атомов/молекул порядка $10^6 \dots 10^7$ [23]. Подобное количество атомов/молекул в расчетной модели зачастую требует автоматизации построения наноструктуры, а также визуализации результатов компьютерного моделирования.

При визуализации процесса деформирования наноструктуры, которая содержит довольно большое количество атомов, необходимо представлять подробную картину пространственного расположения атомов и их связей. Для наглядности восприятия обычно изображают атомы в виде сфер, а также химические связи между атомами в виде линий или цилиндров, в виде соединенных между собой.

Как известно, самым трудным и сложным элементом математической модели наноразмерной системы является геометрия расчетной области и непосредственно используемый в расчетах геометрический аппарат. В случае приближения пространственных характеристик активных элементов электронного прибора к молекулярным и атомным размерам возникает потребность учитывать подробную геометрическую конфигурацию всех его компонент. Именно поэтому, важной является информация о структурных параметрах изучаемых наноматериалов, а также необходимо иметь детальное представление о геометрических и спектральных характеристиках (свойствах) равновесного и квазиравновесных состояний молекул, атомов, и других частиц и их всевозможных различных комбинаций. Очень часто подобные данные в каждом индивидуальном случае бывают неточными, либо недостаточными для получения необходимой информации о моделируемой конфигурации.

В итоге, прежде чем приступить к моделированию главной задачи, зачастую требуется ставить и решать специальные геометрические и спектральные задачи для получения первоначальных данных о геометрической структуре материала, а также возможных ее недостатках и вариациях. Затем, в ходе решения главной задачи требуется параллельно пересчитывать динамические изменения геометрических показателей, для того чтобы проконтролировать основной расчет по геометрическим и спектральным характеристикам. Результатом основных вычислений также может быть как и геометрическая, так и спектральная информация. Тем самым, можно отметить, что геометрический анализ представляет собой неотъемлемую часть вычислительного эксперимента непосредственно на всех его этапах.

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		27

Существует еще один вариант данной проблемы. Когда проведение геометрических вычислений неэффективно, а в ряде случаев и невозможно без визуализации исходных, промежуточных и результирующих данных. Именно поэтому задача визуализации геометрических данных различных классов является очень важным моментом геометрического моделирования.

На практике, при проведении различных научных исследований зачастую встречаются задачи анализа тех или иных данных. Для решения подобных задач на сегодняшний день очень часто используется метод научной визуализации. Сущность данного метода заключается в том, что исходным анализируемым данным при помощи компьютера ставится в соответствие их статическая или динамическая графическая интерпретация, которая визуально анализируется, а результаты анализа этой графической интерпретации, а уже затем истолковываются по отношению к исходным данным. Таким образом, основная задача научной визуализации – это сделать невидимое видимым. Под невидимым подразумеваются как реальные, так и абстрактные объекты, которые непосредственно недоступны человеческому глазу.

Одним из современных и достаточно эффективных методов анализа научных данных можно выделить компьютерную визуализацию данных, её еще называют научной визуализацией. Суть метода заключается в том, что исходным анализируемым данным ставят в соответствие то или иное их статическое или динамическое, пассивное или интерактивное графическое изображение. Его визуально анализируют, а результаты анализа интерпретируют по отношению к исходным данным. При этом исходные данные могут быть различной природы. Разными могут быть как сами задачи анализа получаемых исходных данных, так и используемые графические изображения [1, 2].

Компьютерное атомистическое моделирование современных наноструктурированных материалов на сегодняшний день обладает достаточно высокой предсказательной способностью и большим потенциалом для дальнейшей разработки новых материалов с заданными свойствами и характеристиками. В основе такого моделирования лежат адекватные

исследования молекул. Тем не менее, ввиду стремительного развития области исследования наноматериалов – сложных систем, включающих сотни и тысячи атомов, возникает особенная необходимость расширения базового функционала в области анализа структуры и свойств таких систем.

Программы визуализации данных основаны на геометрическом моделировании, что зачастую предполагает изображение: геометрии объекта; поверхности объекта; среды объекта (освещение и т.д.); цвета и оттенков.

Суть геометрического моделирования вообще состоит в пространственном представлении объекта геометрически правильно в двумерной либо трехмерной системе координат. Выделяют растровую, векторную и фрактальную графику. Фигура может быть изображена в виде набора графических примитивов (отрезков, дуг, окружностей, эллипсов, сплайнов).

В связи с тем, что изображение формируется в системе координат, то задается некий массив точек и тип примитивов, располагающийся между ними. Изображение, располагающееся на экране, имеет возможность быть преобразованным: поворот на угол, растяжение и перенос.

Произвольное преобразование обычно описывают матрицей, при этом вводятся однородные координаты, где добавляется еще одна координата, которая фиксирована. Тогда в двумерной плоскости это матрица из трех величин. В трехмерном пространстве матрицы будут иметь 4 строки и 4 столбца. Чтобы изобразить трехмерное тело, необходимы проекции. Параллельная проекция: точки предмета проецируются непосредственно параллельно заданному направлению лучами. Центральная проекция – это когда все проектирующие лучи проходят через одну точку. Каждая из этих проекций имеет свою матрицу проектирования.

Для моделирования поверхности используют принцип текстуры, т. е. выбираются значительные части поверхности, которые будут заполнены одинаковой текстурой. Текстура состоит из одинаковых рисунков, которые повторяются. Для моделирования цветов используются специальные схемы: трехцветная, для представления на экране, четырехцветная – для печати. В

четырёхцветной схеме существует понятие оттенка.

Моделирование среды представляется следующим образом. Изображение находится в какой-либо среде: свет, тень, фон. Существуют методы изменения цвета объекта, чтобы показать освещение с того или иного места, показать рассеянный свет, сформировать более темную область тени.

Особую роль играет когнитивная графика (интеллектуальная). Ее суть: изображение представляется в виде совокупности элементов, которые записываются в виде одной строки. Сравнение строк позволяет выделять объект, распознать его и связать с ним определенные действия.

Наиболее распространенными объектами современных технологий являются углеродные нанотрубки.

Углеродные нанотрубки – своеобразные цилиндрические молекулы диаметром примерно от половины нанометра и длиной до нескольких микрометров.

В первой главе уже была подробно рассмотрена структура углеродных нанотрубок. Сейчас же остановимся на конкретных типах углеродных нанотрубок. А именно, внимание будет уделено ахиральной углеродной нанотрубке с зигзагообразной структурой и соответственно с зубчатой структурой. Изначально будут построены и рассчитаны их математические модели, а затем на их основе уже будет разработана программа визуализации углеродных нанотрубок.

Геометрически углеродную нанотрубку можно представить как результат сворачивания графитового листа. При этом элементарная ячейка графитовой плоскости переходит при сворачивании в соответствующую ячейку на цилиндрической поверхности с радиусом равным радиусу углеродной нанотрубки.

При компьютерном моделировании атомной структуры и морфологии нанотрубок используют процедуру «свертки» атомных слоев графена. Из этих слоев «вырезают» атомные ленты, которые затем сворачивают в бесшовные цилиндры по схеме представленной на рисунке 8.

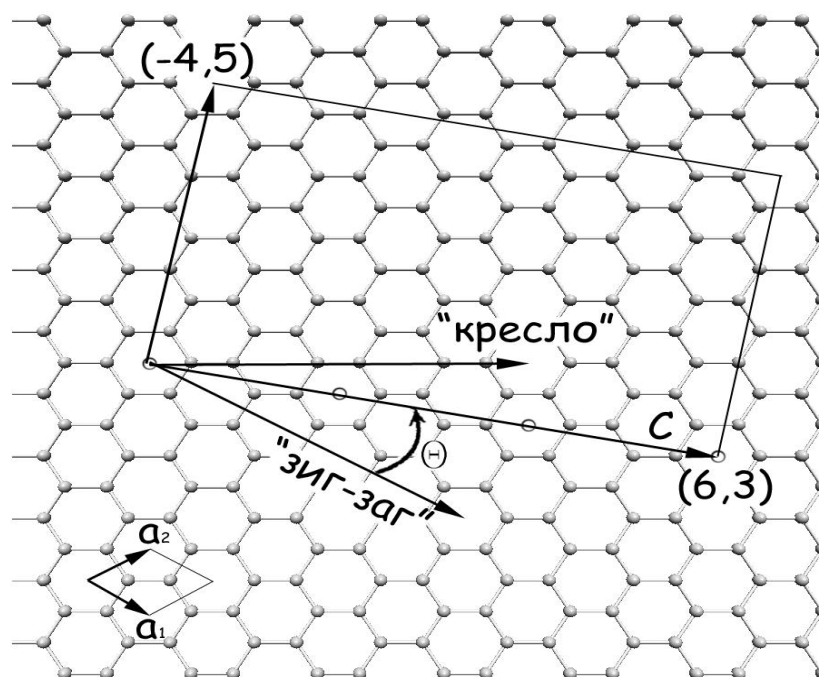


Рисунок 8 – Сворачивание графитового слоя в трубку

Для представления пространственного расположения атомов в нанотрубке задается углеродная нанотрубка как набор идентичных колец, на ней располагаются атомы углерода. При построении графической модели нанотрубки необходимо вводить начальные параметры, к ним относятся:

- 1) $d_0 = 0,142$ нм – наименьшее расстояние между соседними атомами углерода в графитовой плоскости;
- 2) n – количество ячеек в кольце (слое);
- 3) m – количество колец (слоев) в нанотрубке.

Перечисленные параметры потенциально позволяют рассчитать радиус R цилиндра нанотрубки.

В свою очередь, для нахождения внешнего D и внутреннего d диаметров углеродного кольца (рисунок 9), можно использовать формулы:

$$D = 2 \cdot (R + r_{эл}) \quad (3)$$

$$d = 2 \cdot (R - r_{эл})$$

где $r_{эл}$ – ковалентный радиус атома углерода, имеющий табличное значение, он равен 0,077 нм.

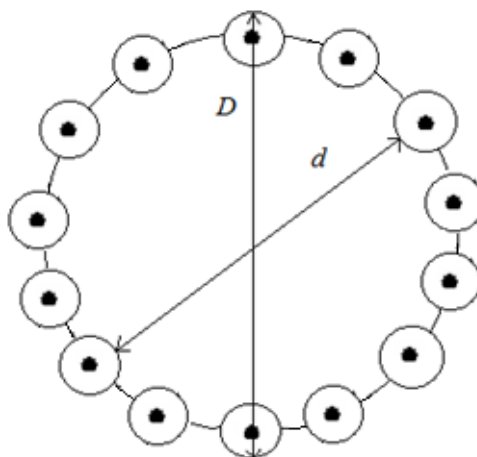


Рисунок 9 – Изображение внутреннего и внешнего диаметров кольца

Кроме того, учитывая рисунок 13 и рисунок 17, демонстрирующие геометрический алгоритм образования рассматриваемых нанотрубок, можно точно рассчитать их массу на основании задаваемой пользователем конфигурации.

А именно, общее число ячеек в нанотрубке равно:

$$N = m \cdot n \quad (4)$$

где n – количество ячеек в кольце (слое);

m – количество колец (слоев) в нанотрубке.

В свою очередь, каждая ячейка автономно использует 4 атома углерода. Следовательно, масса нанотрубки произвольной конфигурации будет равна:

$$M = N \cdot 4m_c = 4nmm_c \quad (5)$$

где m_c – атомная масса углерода, она равна $1,993410^{-26}$ кг.

В следующем пункте рассмотрим математические модели, предлагаемые для определения ключевого параметра R углеродных нанотрубок различной конфигурации.

В качестве объекта исследования были выбраны углеродные нанотрубки типа «зигзаг» или зигзагообразная и типа «кресло» или «зубчатая».

2.2 Математические модели нанотрубки типа «зигзаг»

Структурные параметры углеродной нанотрубки определяются структурой базисных плоскостей графита, симметрией кристаллического графенового слоя относительно оси трубки. Сворачивать графеновый слой можно в разных направлениях. Если его сворачивать перпендикулярно грани, то образуется трубки «zigzag» (зигзагная трубка). На рисунке 10 изображен общий вид нанотрубки со структурой типа «зигзаг».

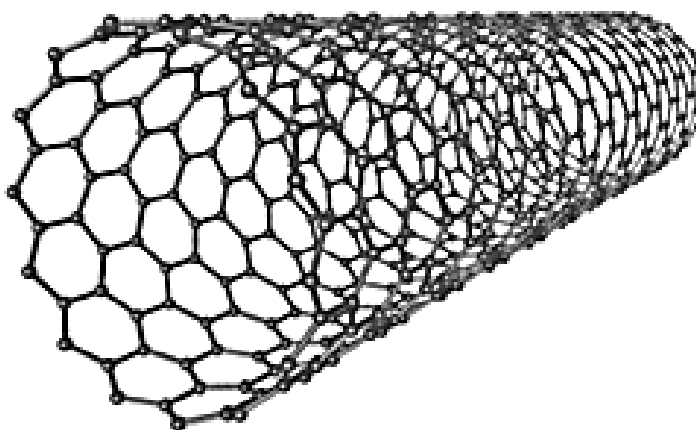


Рисунок 10 – Общий вид нанотрубки со структурой типа «зигзаг»

Развернутый в пленку атомный каркас углеродной нанотрубки со структурой «зигзаг» представлены на рисунке 11.

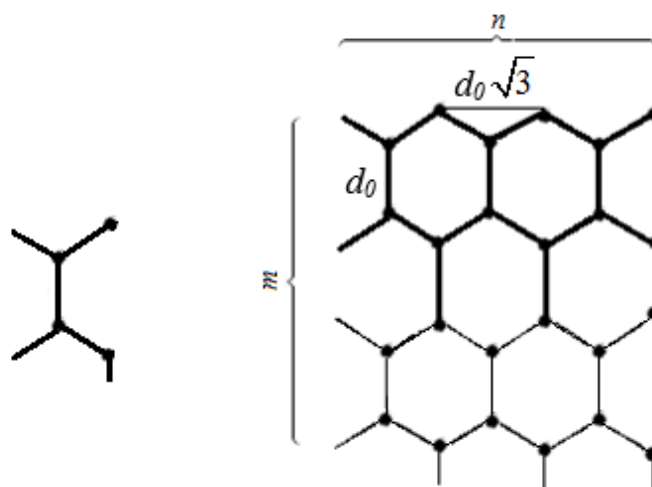


Рисунок 11 – Изображение атомного каркаса углеродной нанотрубки

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата

Ширина элементарной ячейки для нанотрубок со структурой типа «зиг-заг» равна $d_0\sqrt{3}$, где $d_0 = 0,142$ нм – наименьшее расстояние между соседними атомами углерода в графитовой плоскости.

Для представления пространственного расположения атомов в нанотрубке зададим углеродную нанотрубку как набор идентичных колец, на которых находятся атомы углерода. При построении графической модели нанотрубки необходимо вводить начальные параметры, к которым относятся: $d_0 = 0,142$ нм – наименьшее расстояние между соседними атомами углерода в графитовой плоскости; n – количество элементарных ячеек в кольце; R – радиус цилиндра нанотрубки; m – количество слоев.

При нахождении R необходимо учитывать, что сторона x правильного n -угольника (рисунок 12) вычисляется по формуле:

$$x = 2R \sin \frac{\pi}{n} \quad (6)$$

тогда

$$R = \frac{x}{2 \sin \frac{\pi}{n}} = \frac{\sqrt{3}d_0}{2 \sin \frac{\pi}{n}}$$

таким образом:

$$R = \frac{\sqrt{3}d_0}{2 \sin \frac{\pi}{n}} \quad (7)$$

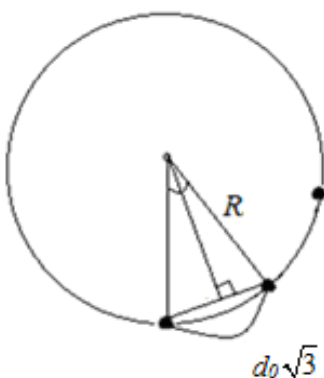


Рисунок 12 – Геометрическая иллюстрация нахождения стороны правильного n -угольника

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата
------	------	----------	---------	------

Рассмотрим схему расчета атомного каркаса углеродной нанотрубки типа «зигзаг».

Координаты вершин 1 и 2 шестиугольников (рисунок 13), расположенных на верхнем кольце и рассчитываются в цикле по формулам:

$$x_i = R \cdot \cos\left(\frac{\pi}{n}\right);$$

$$y_i = R \cdot \sin\left(\frac{\pi}{n}\right); \tag{8}$$

$$z_i = d;$$

где $0 \leq d \leq 3d_0 \cdot s$ изменяется с шагом $3d_0$.

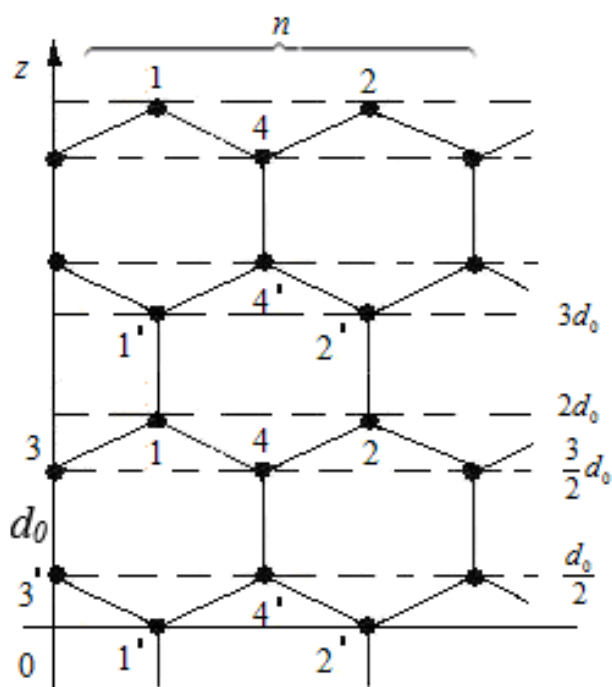


Рисунок 13 – Схема углеродной нанотрубки с зигзагообразной структурой

Второе кольцо смещено относительно первого кольца по оси Z на расстояние равное $\Delta z_{i+1} = d + d_0 / 2$, а по осям X и Y на угол $\beta = \pi/n$. Тогда для перемещенных координат узлов 3 и 4 расположенных на втором кольце определим

по формулам:

$$x_{i+1} = R \cdot \cos((\pi/n) \cdot (i-1) + \beta); \quad (9)$$

$$y_{i+1} = R \cdot \sin((\pi/n) \cdot (i-1) + \beta);$$

где i – номер атома, $i = 1..2n + 1$ с шагом 2.

Точки $3'$ и $4'$ удалены на расстояние равное длине химической связи от точек 3 и 4 . Точки $3'$, $1'$, $4'$ являются зеркальным отражением точек 3 , 1 , 4 . На следующем шаге в цикле соединяем точки линиями.

Отметим, что следуя рисунку 13, если координаты z точек $1'$, $2'$ и т.д. равны 0, то координаты z точек $3'$, $4'$ и т.д. равны $1/2d_0$; координаты z точек $3, 4$ и т.д. равны $3/2d_0$; координаты z точек $1, 2$ и т.д. равны $2d_0$.

В свою очередь, координаты z одноименных точек следующего кольца, расположенного выше рассматриваемого кольца, будут иметь приращение $3d_0$.

2.3 Математические модели нанотрубки типа «кресло»

При сворачивании графитовой сетки вдоль грани шестиугольника образуется трубка «armchair» (кресельная трубка), при этом атомы углерода и центры гексагональных колец лежат на окружности, образуя правильный многоугольник, также как и в случае с трубкой типа «зигзаг». Общий вид нанотрубки со структурой типа «кресло» изображен на рисунке 14.

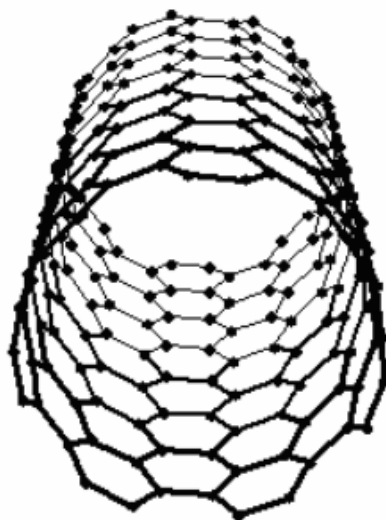


Рисунок 14 – Общий вид нанотрубки со структурой типа «кресло»

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата

ВКР.165638.09.04.01.ПЗ

Лист

37

Развернутый в пленку атомный каркас углеродной нанотрубки со структурой типа «кресло» представлен на рисунке 15.

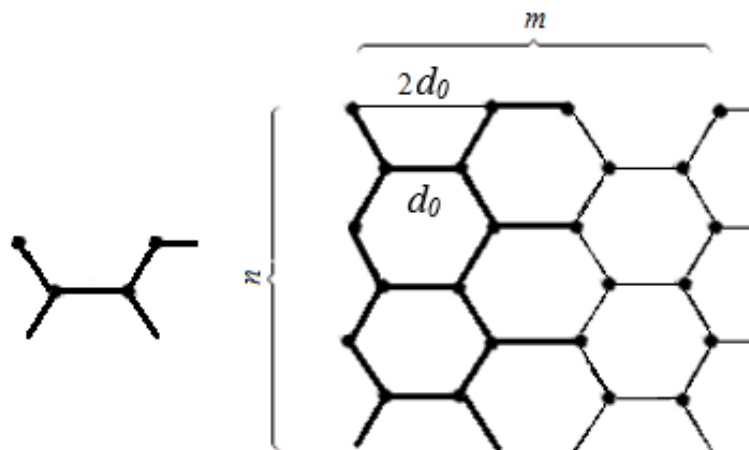


Рисунок 15 – Изображение атомного каркаса углеродной нанотрубки

Геометрическое представление расположения атомов в углеродной нанотрубке представлено на рисунке 16.

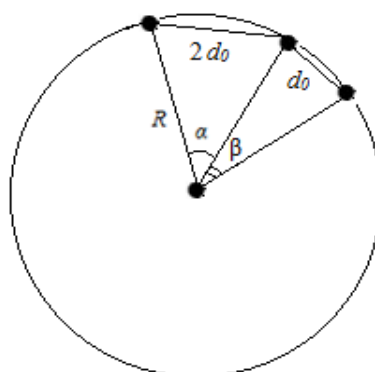


Рисунок 16 – Геометрическая иллюстрация нахождения стороны правильного n -угольника

На основании рисунка 16 представим:

$$\begin{cases} \alpha + \beta = \frac{2\pi}{m}, \\ \sin \frac{\alpha}{2} = \frac{2d_0}{2R}, \\ \sin \frac{\beta}{2} = \frac{d_0}{2R} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \alpha + \beta = \frac{2\pi}{m}, \\ \sin \frac{\alpha}{2} = \frac{d_0}{R}, \\ \sin \frac{\beta}{2} = \frac{d_0}{2R} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \alpha + \beta = \frac{2\pi}{m}, \\ \sin \frac{\alpha}{2} = \frac{d_0}{R}, \\ 2 \sin \frac{\beta}{2} = \frac{d_0}{R} \end{cases}$$

$$2 \sin \frac{\beta}{2} = \sin \frac{\alpha}{2}, \quad \beta = \frac{2\pi}{m} - \alpha,$$

где m – количество ячеек в кольце.

Подставляя значение β , получим

$$2 \sin \left(\frac{\pi}{m} - \frac{\alpha}{2} \right) = \sin \frac{\alpha}{2}.$$

Используя формулы сложения $\sin(\alpha - \beta) = \sin \alpha \cdot \cos \beta - \cos \alpha \cdot \sin \beta$, получим:

$$2 \sin \frac{\pi}{m} \cdot \cos \frac{\alpha}{2} - 2 \cos \frac{\pi}{m} \cdot \sin \frac{\alpha}{2} = \sin \frac{\alpha}{2},$$

откуда

$$2 \sin \frac{\pi}{m} = \frac{\sin \frac{\alpha}{2} + 2 \cos \frac{\pi}{m} \cdot \sin \frac{\alpha}{2}}{\cos \frac{\alpha}{2}},$$

$$2 \sin \frac{\pi}{m} = \frac{\sin \frac{\alpha}{2} \cdot \left(1 + 2 \cos \frac{\pi}{m} \right)}{\cos \frac{\alpha}{2}},$$

$$\frac{\sin \frac{\alpha}{2}}{\cos \frac{\alpha}{2}} = \operatorname{tg} \frac{\alpha}{2},$$

$$2 \sin \frac{\pi}{m} = \operatorname{tg} \frac{\alpha}{2} \cdot \left(1 + 2 \cos \frac{\pi}{m} \right),$$

$$\operatorname{tg} \frac{\alpha}{2} = \frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}},$$

$$\frac{\alpha}{2} = \operatorname{arctg} \frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}},$$

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата
------	------	----------	---------	------

$$\alpha = 2 \operatorname{arctg} \frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}},$$

учитывая, что $\sin \frac{\alpha}{2} = \frac{d_0}{R}$, выразим радиус:

$$R = \frac{d_0}{\sin \frac{\alpha}{2}} \quad (10)$$

подставим в формулу 10, получим:

$$R = \frac{d_0}{\sin \left(\operatorname{arctg} \frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}} \right)}$$

Используя формулу обратных тригонометрических функций:

$$\sin(\operatorname{arctg} x) = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}$$

получим:

$$\begin{aligned} \frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}} \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}} \right)^2} &= \frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4 \sin^2 \frac{\pi}{m}}{\left(1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}\right)^2}}} = \\ &= \frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{\left(1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}\right) \cdot \sqrt{\frac{\left(1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}\right)^2 + 4 \sin^2 \frac{\pi}{m}}{\left(1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}\right)^2}}} = \end{aligned}$$

воспользуемся основными тригонометрическими тождествами:

$$\sin^2 \alpha + \cos^2 \alpha = 1,$$

$$\left| \cos^2 \frac{\pi}{m} + \sin^2 \frac{\pi}{m} = 1, \right.$$

$$\left| 4 \left(\cos^2 \frac{\pi}{m} + \sin^2 \frac{\pi}{m} \right) = 4 \right.$$

в результате получим:

$$= \frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{\left(1 + 2 \cos \frac{\pi}{m} \right) \cdot \frac{\sqrt{1 + 4 \cos \frac{\pi}{m} + 4 \cos^2 \frac{\pi}{m} + 4 \sin^2 \frac{\pi}{m}}}{1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}}} = \frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{\sqrt{5 + 4 \cos \frac{\pi}{m}}}.$$

Откуда искомый радиус будет иметь следующий вид:

$$R = \frac{d_0}{\frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{\sqrt{5 + 4 \cos \frac{\pi}{m}}}} = \frac{d_0 \sqrt{5 + 4 \cos \frac{\pi}{m}}}{2 \sin \frac{\pi}{m}}.$$

Те есть при рассмотрении модифицированной структуры нанотрубки следует учитывать, что радиус цилиндра вычисляется по формуле:

$$R = \frac{d_0 \sqrt{5 + 4 \cos \frac{\pi}{m}}}{2 \sin \frac{\pi}{m}}. \quad (11)$$

Представим графическую модель углеродной нанотрубки со структурой типа «кресло» на рисунке 17.

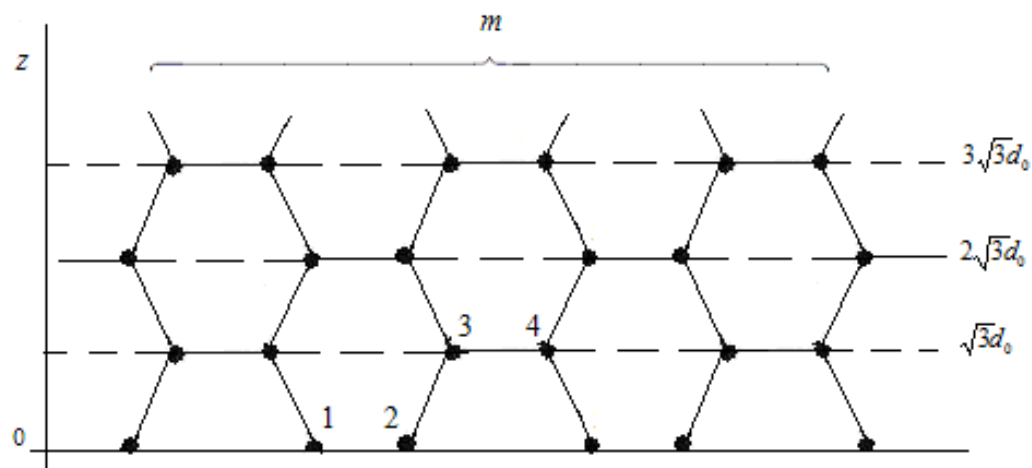


Рисунок 17 – Схема углеродной нанотрубки с «зубчатой» структурой

На первом шаге координаты вершин 1 и 2 шестиугольников, рассчитываются по формулам:

$$x_i^{1,2} = R \cdot \cos \varphi \quad (12)$$

$$y_i^{1,2} = R \cdot \sin \varphi$$

$$z_i^{1,2} = \sqrt{3}d_0 \cdot (j-1), \quad j=1:n,$$

где j - номер слоя,

$$\varphi = \frac{\alpha}{2} + (\alpha + \beta) \cdot (i-1)$$

$$\alpha = 2 \arctg \frac{2 \sin \frac{\pi}{m}}{1 + 2 \cos \frac{\pi}{m}},$$

$$\beta = \frac{2\pi}{m} - \alpha.$$

На втором шаге, координата вершины 3 вычисляется по формулам:

$$\varphi_1 = (\alpha + \beta) \cdot i - \frac{\beta}{2}, \quad (13)$$

$$x_i^3 = R \cdot \cos \varphi_1,$$

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата
------	------	----------	---------	------

$$y_i^3 = R \cdot \sin \varphi_1,$$

$$z_i^3 = \sqrt{3}d_0 \left(j - \frac{1}{2} \right)$$

и соответственно координата вершины 4 :

$$\varphi_2 = (\alpha + \beta) \cdot i + \frac{\beta}{2}, \quad (14)$$

$$x_i^4 = R \cdot \cos \varphi_2,$$

$$y_i^4 = R \cdot \sin \varphi_2,$$

$$z_i^4 = \sqrt{3}d_0 \left(j - \frac{1}{2} \right).$$

Разработанные математические модели расчета ахиральных углеродных нанотрубок позволяет с единых позиций визуализировать данные структуры с целью прогнозирования свойств наноструктур.

В результате исследования была построена модель решетки углеродной нанотрубки, в которой межатомные связи моделируются линейно-упругими цилиндрическими стержнями.

Предложенный подход, позволяет связать дискретное описание взаимодействия частиц, моделирующих атомы решетки, и континуальное описание основа на классической теории стержней.

Алгоритм построения углеродной нанотрубки представлен на рисунке 18.

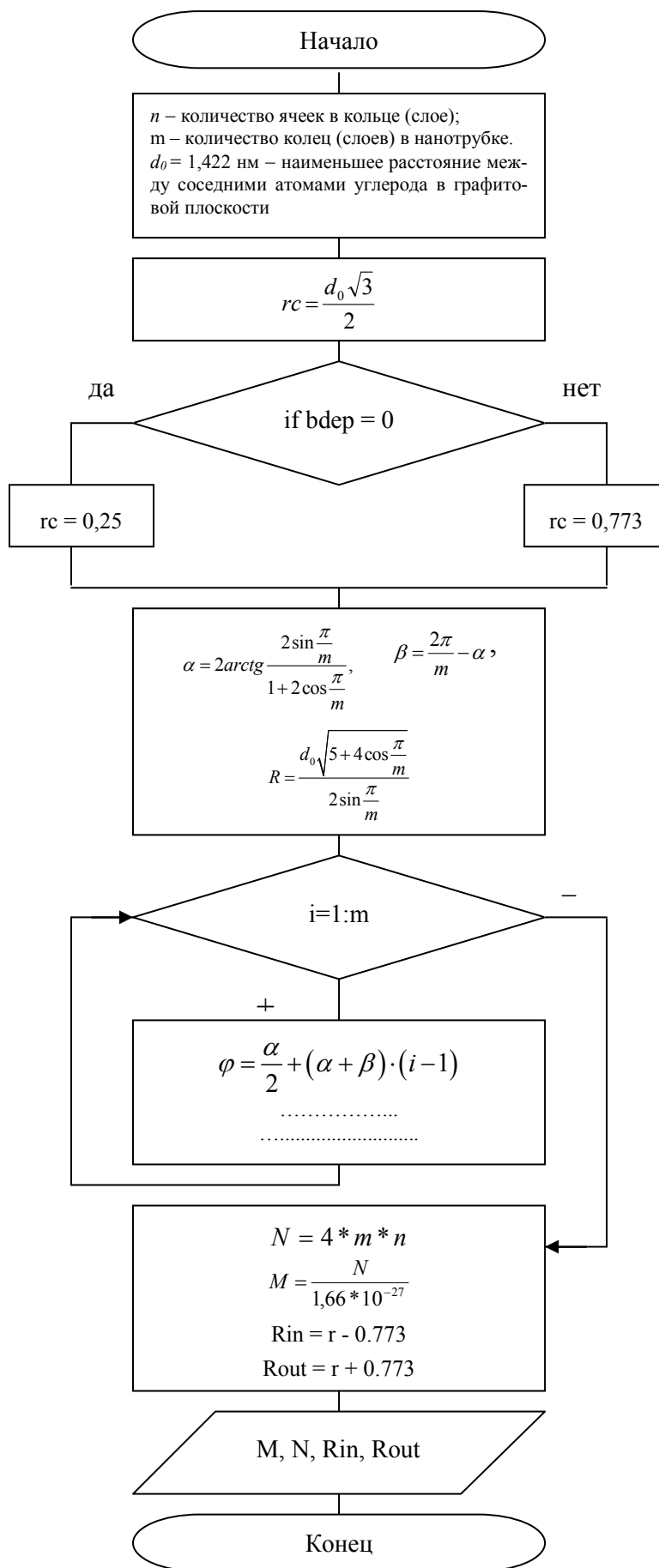


Рисунок 18 – Алгоритм построения углеродной нанотрубки

3 РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ ВИЗУАЛИЗАЦИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

3.1 Обзор существующих программных продуктов

На сегодняшний день одним из современных и довольно эффективных методов анализа научных данных является компьютерная визуализация данных, ее ещё принято называть научной визуализацией. Суть метода заключается в том, что исходным анализируемым данным ставят в соответствие то или иное их статическое либо динамическое, пассивное или интерактивное графическое изображение. Его визуально анализируют, а результаты анализа интерпретируют по отношению к исходным данным. При этом исходные данные могут быть различной природы. Разными могут быть даже сами задачи анализа исходных данных, а также используемые графические изображения [1, 2].

Научная визуализация берет своё начало с простой визуализации функциональных зависимостей, которая была представлена в виде графиков и карт изолиний. В настоящий момент уже используются сложные методы объемной визуализации физических полей и компьютерной анимации глобальных изменений во Вселенной. Научную визуализацию используют в самых различных областях, так например, она применяется в определенных разделах физики, медицинских исследованиях, геологии, метеорологии и многих других сферах. Научная визуализация также используется при исследовании различных нанообъектов, которые значительно отличаются по своим свойствам от наиболее крупных объектов. Изучение, моделирование и прогнозирование наноструктур требует визуализации атомов, пространственного распределения электронной плотности и молекулярных орбиталей в подобных структурах. Помимо этого, актуальностью еще пользуется визуализация различных скалярных и векторных полей наноструктур [1].

На сегодняшний день работы в области научной визуализации наноструктур стремительно ведутся не только за рубежом, но и в России. Образцами подобных работ является разработка учебно-методического комплекса «Мно-

гомасштабное моделирование в нанотехнологиях» на базе Центра фотохимии РАН [5], работы по изучению визуализации атомномолекулярных структур на базе НИВЦ МГУ имени М.В. Ломоносова [6], а также работы консорциума Interactive NanoVisualization in Science and Engineering Education (IN-VSEE) [7], исследования на базе системы NanoManipulator, проводимые в университете Северной Каролины, США [8] и др.

В последнее время метод научной визуализации очень активно применяется при проведении разнообразных исследований в области компьютерного моделирования наноструктур в Национальном исследовательском ядерном университете МИФИ [4].

Научную деятельность относительно визуализации наноструктур ведут кафедра «Компьютерное моделирование и физика наноструктур и сверхпроводников» совместно с учебно-научной лабораторией «Научная визуализация» НИЯУ МИФИ. В них еще принимает участие Британский национальный центр компьютерной анимации.

Работы ведутся по четырем направлениям:

- разработка комплекса инструментальных программных средств научной визуализации;
- создание прикладных программ визуализации наноструктур с использованием этого комплекса;
- апробация прикладных программ для визуализации результатов моделирования конфигурации наноструктур, полученных в процессе оптимизации их геометрии в различных приближениях квантово-механических расчетов;
- апробация прикладных программ визуализации результатов моделирования наноструктурированных сверхпроводящих элементов.

Комплекс инструментальных программных средств научной визуализации состоит из совокупности автономно и совместно используемых программных продуктов 3ds Max, HyperFun, апплет Jmol, Cortona3D Viewer, и их функциональных расширений. Инструментальные программные средства комплекса

научной визуализации обладают обширными функциональными возможностями, которые позволяют создавать на их основе сложные прикладные программы для пассивной и интерактивной визуализации.

Созданные на базе инструментальных программных средств прикладные программы визуализации используются для решения разного рода задач анализа исследуемых наноструктур [4]. Среди них выделяются три стандартные задачи анализа:

- взаимного расположения компонентов исследуемой наноструктуры;
- скалярных полей исследуемой наноструктуры;
- скалярных и векторных полей в наноструктурированных 2D и 3D сверхпроводниках.

На сегодняшний день имеется довольно большой выбор визуализаторов/редакторов атомной структуры молекул и кристаллических структур. Все они без исключения различаются своим интерфейсом и комплектом функциональных возможностей.

Необходимо заметить, что целый ряд близких задач для расчетов молекул и кластеров решают с применением программ Chemcraft [10].

Для исследования молекул наиболее часто применяются программные продукты ChemCraft (www.chemcraft.org), Hy-perChem (www.hyper.com), Mercury (<http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/mercury/>), так как они являются достаточно разработанными. Набор функциональных возможностей каждой из них довольно развит для реализации специфических задач:

- ChemCraft позволяет обрабатывать выходные файлы ряда квантово-химических программ (визуализировать данные об электронной структуре и др.), редактировать и проводить анализ симметрии атомной структуры исследуемой системы.
- HyperChem удобное средство для построения атомной структуры, поскольку после геометрического построения, пользователь может выполнить оптимизацию полученной структуры в рамках метода молекулярной механики.

– Mercury является программой для работы с данными рентгеноструктурного анализа кристаллов, позволяет рассмотреть упаковку и ближайшее окружение отдельной молекулы, характер ее упаковки в кристалле, провести необходимые измерения.

Итак, в процессе исследования возникает потребность перехода от одной программы к другой, что естественно затрудняет и замедляет работу. Имеется большое множество программных средств, которые непосредственно направлены на исследования нанообъектов. В подобных программах применяются разнообразные методы исследования состояния совокупностей атомов и молекул. Например, в английской версии Википедии дано описание более 50 программных средств для исследования наноструктур.

Таким образом, осуществим анализ только свободно распространяемых программных средств с удобным интерфейсом, не специализирующихся на одной задаче. Рассмотрим примеры таковых прикладных программ визуализации анализируемых наноструктур.

Развитие современного мира влечет за собой потребность во все более частом применении нанотрубок, тем самым разрабатываются новые программные средства для создания моделей наноструктур и их изучения. Нанотрубка, как известно, представляет собой один из важнейших объектов исследования с помощью подобных средств. Все чаще на сегодняшний день происходит автоматизация создания моделей различных видов нанотрубок. К примеру, в программном комплексе Nanoengineer-1 компании Nanorex нанотрубки, фуллерены, графены являются такими же примитивами, как параллелепипед, конус, пирамида и цилиндр в известных программах компьютерной графики.

Наиболее практичным и удобным интерфейсом считается у программного продукта Nanoengineer-1 компании Nanorex [3]. В данной программе предусмотрено моделирование по основным параметрам нанотрубок, графена, кристаллических решеток. Также имеется несколько настроек по визуализации, в частности по созданию трехмерного изображения. Характерная особенность программы заключается в возможности построения простейших наномеханиз-

является Open Babel. В середине 2011 года Open Babel позволял конвертировать данные между 113 форматами.

Итак, все указанные выше программные продукты владеют некоторыми важными характеристиками и вместе они образуют комплекс программ, удобный для изучения наноструктур методом молекулярной динамики. Но вот программное средство Nanoengineer-1 уже является комплексом программ, куда включены модули других программных средств, таких как Open Babel.

Анимационная программа визуализации изоповерхности для параметра порядка трехмерного сверхпроводника 2-го рода. В качестве исходных данных в этой программе используют описание анализируемого поля параметра порядка сверхпроводника 2-го рода в формате ТХТ-файла (сверхпроводник моделируется с помощью уравнений Гинзбурга-Ландау). Результатом работы программы визуализации является анимационное проекционное графическое изображение изоповерхности поля (поверхность определяет положение и конфигурацию вихрей Абрикосова). При помощи данной программы решают задачу анализа конфигураций вихрей Абрикосова в исследуемом трехмерном сверхпроводнике.

Анимационная программа объемной визуализации электронной плотности нанобъектов Cl_2O . В качестве исходных данных в этой программе используют описание анализируемого поля электронной плотности нанокластера Cl_2O в формате ТХТ-файла [28]. Результат работы программы визуализации – анимационное проекционное графическое изображение совокупности полупрозрачных изоповерхностей поля (объемная визуализация). При помощи данной программы решают задачу анализа поля электронной плотности исследуемого нанокластера.

Программа визуализации нанобъектов различных типов. В качестве исходных данных в этой программе используют описание исследуемого нанобъекта того или иного типа, представленного в одном из следующих форматов: XYZ, HIN, OUT, MOL. Результат работы программы визуализации – интерактивное проекционное графическое изображение визуализируемого нанобъекта

[32]. Программа может также измерять расстояния между атомами, углы между связями, строить гистограммы, производить редактирование наноструктуры. При помощи этой программы можно решать задачу качественного и количественного анализа взаимного расположения атомов в исследуемой наноструктуре.

Исходные данные в разработанных прикладных программах визуализации в виде XYZ, HIN, OUT, MOL, TXT-файлов – результат работы программ компьютерного моделирования исследуемых наноструктур. В качестве примера таких программ можно упомянуть широко известные HyperChem, Gamess [10,11] и др., а также программы, написанные в НИЯУ МИФИ [29].

На сегодняшний день уже разработанные прикладные программы визуализации наноструктур объединены в единую библиотеку, доступ к которой можно получить через Интернет.

3.2 Характеристика среды разработки программы

В качестве инструментальной среды для моделирования интерфейса используется система MATLAB. Система MATLAB (MATrix LABoratory матричная лаборатория) была создана специалистами фирмы MathWorks, Inc как язык программирования высокого уровня для технических вычислений. Особенно тщательно в MATLAB проработаны алгоритмы матричных операций, лежащие в основе большинства средств моделирования сложных систем. Эти высокоэффективные алгоритмы и реализующие их программные коды получили широкую известность и признание во всем мире, превратив систему MATLAB в один из самых мощных и эффективных инструментов для создания разнообразных программных комплексов, предназначенных для решения научно-технических задач.

Одним из самых важных и по достоинству оцененных качеств системы MATLAB является возможность ее модификации с целью решения все более новых и новых научно-технических задач, которые в изобилии появляются благодаря прогрессу в науке, технике и образовании. Это достигается, прежде всего, созданием целого ряда пакетов расширения системы, охватывающих многие новые и практически полезные направления компьютерной математики. У сис-

темы MATLAB число этих пакетов составляет уже многие десятки, а документация по ним насчитывает десятки тысяч страниц.

Система MATLAB обладает открытой архитектурой, это, в свою очередь, дает пользователям абсолютный доступ к ее кодам на гибком и мощном, а главное простом, языке программирования данной системы. MATLAB считается одним из наилучших и высокоэффективных языков программирования для научно-технических расчетов, а также в случае создания удобных и весьма наглядных визуально-ориентированных средств анализа, идентификации, построения и моделирования систем.

Язык MATLAB представляет собой высокоуровневый интерпретируемый язык программирования, который включает основанные на матрицах структуры данных, обширный спектр функций, интегрированную среду разработки, объектно-ориентированные возможности и интерфейсы к программам, написанным на других языках программирования.

Выделяют два типа программ написанные на MATLAB – функции и скрипты. Первые включают входные и выходные аргументы, а также собственное рабочее пространство для хранения промежуточных результатов вычислений и переменных. В отличие от функции, скрипты, в свою очередь, используют общее рабочее пространство. Оба типа не компилируются в машинный код, а сохраняются в виде текстовых файлов. Еще имеется возможность сохранять pre-parsed программы – это также функции и скрипты, которые обработанные в вид, удобный для машинного исполнения. Плюс их в том, что подобные программы выполняются намного быстрее обычных, а особенно если функция включает в себя команды построения графиков.

Графическая система MATLAB содержит в себе команды высокого уровня для визуализации двух- и трехмерных данных, обработки изображений, анимации и иллюстрированной графики. Но еще она включает в себя команды и низкого уровня, которые позволяют целиком изменять внешний вид графики, также как в случае создания Графического Пользовательского Интерфейса (GUI) для MATLAB приложений. Для разработки приложений с графическим

интерфейсом пользователя в состав MATLAB входит специально разработанная среда GUIDE. В данной среде работа осуществляется довольно просто. Для начала элементы управления (кнопки, раскрывающиеся списки и т.д.) размещаются при помощи мыши, затем происходит программирование события, они возникают в случае обращения пользователя к данным элементам управления.

Само приложение может иметь либо одно основное окно, либо несколько окон. Вывод графической и текстовой информации может производиться как в основное окно приложения, так и в отдельные окна. Некоторые функции системы MATLAB применяются для формирования типовых диалоговых окон открытия и сохранения файла, печати, выбора шрифта, окна для ввода данных и др., их непосредственно можно использовать в собственных приложениях.

Теперь рассмотрим саму организацию иерархической структуры и свойства графических объектов. В случае если не были открыты графические окна, то высокоуровневая графическая функция plot создает ряд графических объектов: сначала – графическое окно, затем – оси и, наконец – линию. Все без исключения графические объекты MATLAB располагаются в определенной иерархии, оси являются «потомком» графического окна и тем самым не имеют возможности существовать самостоятельно. Но графическое окно, в свою очередь, является «предком» для осей.

В общем виде, с помощью функции plot(x1, y1, s1, x2, y2, s2, ...) можно объединить несколько графиков функций y1(x1), y2(x2),..., проведя их со стилями s1, s2, ... В случае функции вида plot(x1, y1, s1, x1, y1, s2) можно провести линию графика единственной функции y1(x1) одним цветом, а точки на нём (вычисляемые точки) выделить другим цветом.

Стили s1, s2,... задаются в виде набора трёх символьных маркеров, заключенных в одиночные кавычки. Первый, и не обязательно по порядку, из этих маркеров задаёт тип линии. При этом разрешено указывать не все три маркера. Тогда используются необходимые маркеры, установленные «по умолчанию». Порядок, в котором указываются маркеры, не является значимым, а именно 'r+-' и '-+r' приводят к одинаковому результату.

вается вертикальной оси системы координат, таким образом, что график функции оказывается «вписанным» в прямоугольник.

В случае, если необходимо отказаться от подобной особенности масштабирования при построении графиков в системе MATLAB, то прямым образом придется навязать свои пределы изменения переменных по осям координат. Подобная процедура производится при помощи функции `axis([xmin, xmax, ymin, ymax])`. Необходимо заметить, что команду на выполнение данной функции можно вводить с клавиатуры множество раз и уже после построения графика функции. Это делается для того, чтобы видя получающиеся визуальные изображения, модно было добиться наилучшего восприятия. Данное масштабирование дает возможность получить детальные изображения именно тех частей графика, которые вызывают особенный интерес в конкретном исследовании. К примеру, для ранее полученного графика функции `sin`, можно сузить пределы по осям координат.

Применение графического интерфейса дает возможность пользователю сделать программу более универсальной. Любой процесс проектирования имеет свои этапы, так и в случае с процессом построения графического интерфейса пользователя, выделяют следующие его этапы:

- постановка задачи;
- создание формы интерфейса и создание на неё элементов управления;
- написание кода программы и кода обработки событий.

Этапы построения графического интерфейса пользователя:

- на первом этапе проводится анализ поставленной задачи и определяется количество и состав элементов управления необходимых для решения задачи;
- на втором этапе создаётся форма графического интерфейса и на ней создаются и размещаются элементы управления. Здесь же происходит описание их свойств;
- на третьем этапе создания графического интерфейса пользователя (GUI) пишется код основной программы вычисления и код для обработки событий.

В системе MATLAB предусмотрено несколько команд и функций для построения трехмерных графиков. Значения элементов числового массива рассматриваются как z-координаты точек над плоскостью, определяемой координатами x и y. Возможно несколько способов соединения этих точек. Первый из них представляет собой соединение точек в сечении (функция plot3), второй – построение сетчатых поверхностей (функции mesh и surf). Поверхность, построенная с помощью функции mesh, – это сетчатая поверхность, ячейки которой имеют цвет фона, а их границы могут иметь цвет, который определяется свойством EdgeColor графического объекта surface. Поверхность, построенная с помощью функции surf, – это сетчатая поверхность, у которой может быть задан цвет не только границы, но также и ячейки.

3.3 Структура и возможности программного продукта

На основе рассмотренных математических моделей и алгоритмов для визуализации атомных каркасов ахиральных углеродных нанотрубок разработана «Программа визуализации атомного каркаса ахиральных углеродных нанотрубок». Разработанная программа позволяет выполнять следующие операции:

- по исходным начальным данным определять пространственные координаты атомного каркаса ахиральных углеродных нанотрубок;
- выводить графические модели ахиральных углеродных нанотрубок заданных параметров.

Для работы программы необходимы следующие технические средства и программное обеспечение: IBM PC-совместимый компьютер, операционная система Windows XP, пакет прикладных программ МАТЛАБ.

Современные методы программирования подразумевают не последовательное выполнение программы, а ее объективную реакцию на действия пользователя. Для удачной реализации этого подхода необходимо применять современные концепции программирования. К ним можно отнести, во первых, концепцию модульного программирования. Ее суть заключается в создании готового программного продукта, который состоит из модулей, и его можно соби-

рять как конструктор. Модуль, в свою очередь, это часть программы, компилируемая отдельно от остальных. Именно возможность отдельной компиляции и является основным преимуществом модулей. Частным случаем модульного программирования является выделение часто повторяющихся кусков кода в функции.

Структура программного продукта представлена на рисунке 19.

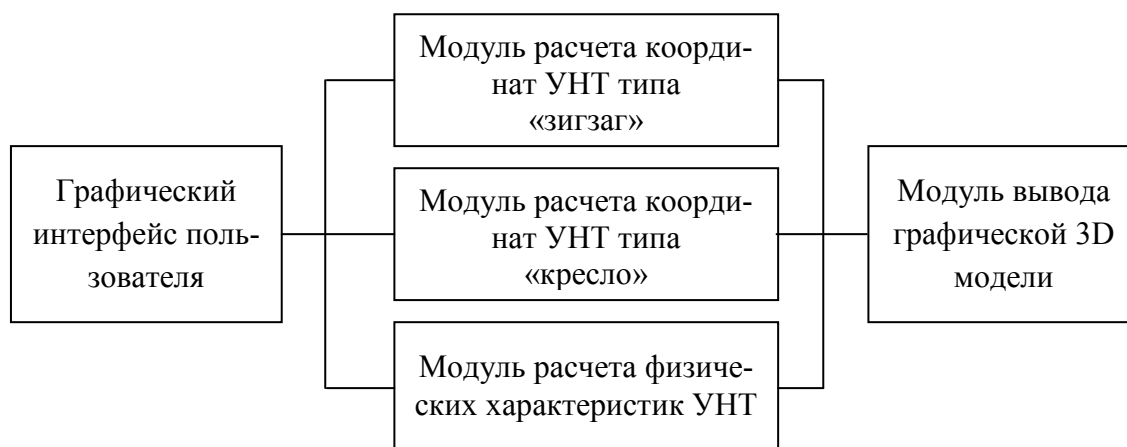


Рисунок 19 – Модульная структура программного продукта

В качестве исходных данных в этой программе используют описание исследуемого нанобъекта того или иного типа, представленного в формате XYZ.

Разработанное приложение не требует специальной подготовки и просто в использовании. Все необходимые данные вводятся в одном окне.

Для проверки эффективной работы разработанного программного комплекса были решены тестовые задачи.

Одним из основных элементов разработанного Windows-приложения является меню пользователя. В состав главного меню входят: «Файл» и «Помощь». Пункт меню «Файл» окна ввода исходных данных позволяет сохранять и загружать исходные данные.

Предложим следующие алгоритмы создания упрощенной трехмерной модели визуализации атомных каркасов углеродных нанотрубок типа «зигзаг» и «кресло».

Рисуется первое кольцо:

```

for i=1:2:2*n+1
    x(i)=r*cos(pi/n*(i-1));
    y(i)=r*sin(pi/n*(i-1));
    z(i)=d;
    surf1(xc.*rc+x(i),yc.*rc+y(i),zc.*rc+z(i)), hold on,

```

Относительно него рисуется второе кольцо со смещением по осям X и Y на π/n и по оси Z смещаем на $a/2$:

```

x(i+1)=r*cos(pi/n*(i-1)+pi/(n));
y(i+1)=r*sin(pi/n*(i-1)+pi/(n));
z(i+1)=d+a/2;
surf1(xc.*rc+x(i+1),yc.*rc+y(i+1),zc.*rc+z(i+1))

```

```

for i=1:2:2*n+1

```

```

    x(i)=r*cos(pi/n*(i-1)+pi/(n));
    y(i)=r*sin(pi/n*(i-1)+pi/(n));
    z(i)=d+rcc/2;
    x(i+1)=r*cos(pi/n*(i-1)+pi/(n));
    y(i+1)=r*sin(pi/n*(i-1)+pi/(n));
    z(i+1)=d+3/2*rcc;
    plot3([x(i),x(i+1)],[y(i),y(i+1)],[z(i),z(i+1)]),'k','LineWidth',2)

```

```

end

```

```

for i=1:2:2*n+1

```

```

    x(i)=r*cos(pi/n*(i-1)+pi/(n));
    y(i)=r*sin(pi/n*(i-1)+pi/(n));
    z(i)=d+3/2*rcc;
    surf1(xc.*rc+x(i),yc.*rc+y(i),zc.*rc+z(i)),
    x(i+1)=r*cos(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    y(i+1)=r*sin(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    z(i+1)=d+2*rcc;
    surf1(xc.*rc+x(i+1),yc.*rc+y(i+1),zc.*rc+z(i+1)),

```

```

end

```

```

plot3(x,y,z,'k','LineWidth',2)
for i=1:2:2*n+1
    x(i)=r*cos(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    y(i)=r*sin(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    z(i)=d+2*rcc;
    x(i+1)=r*cos(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    y(i+1)=r*sin(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    z(i+1)=d+3*rcc;
    plot3([x(i),x(i+1)],[y(i),y(i+1)],[z(i),z(i+1)],'k','LineWidth',2)
end
end

```

Результаты графического моделирования углеродной нанотрубки с зигзагообразной структурой представлены на рисунке 20.

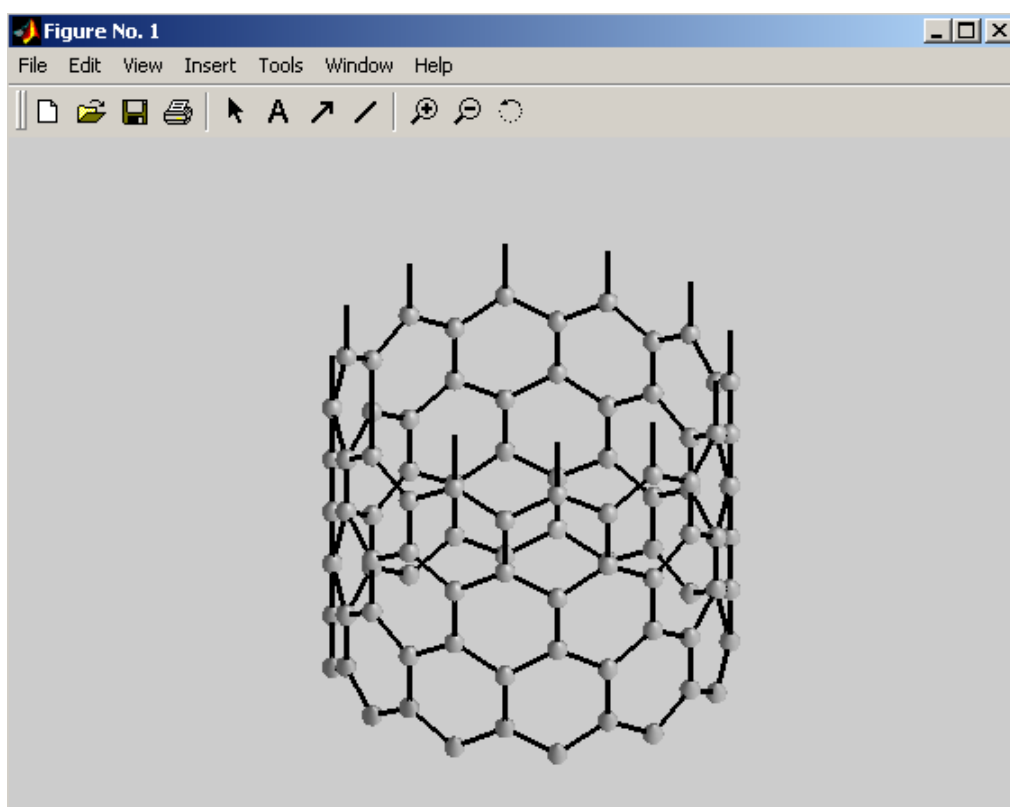


Рисунок 20 – Результаты графического вывода углеродной нанотрубки с зигзагообразной структурой

Для нанотрубки с зубчатой структурой, алгоритм будет выглядеть следующим образом:

```

for j=1:n;
    for i=1:m;
        t=0:0.01:2*pi;
        plot3(r*cos(t),r*sin(t),t*0+2*rs*(j-1)), hold on
        q1=a/2+(a+b)*(i-1);
        x1=r*cos(q1); y1=r*sin(q1); z1=2*rs*(j-1);
        surf1(xc.*rc+x1, yc.*rc+y1, zc.*rc+z1), axis('equal'),
        q2=a/2+b+(a+b)*(i-1);
        x2=r*cos(q2); y2=r*sin(q2); z2=2*rs*(j-1);
        surf1(xc.*rc+x2, yc.*rc+y2, zc.*rc+z2),
        plot3(r*cos(t),r*sin(t),t*0+rs+2*rs*(j-1)),
        plot3([x1 x2],[y1 y2],[z1 z2],'k','LineWidth',2);
        q3=a+b/2+(a+b)*(i-1);
        x3=r*cos(q3); y3=r*sin(q3); z3=rs+2*rs*(j-1);
        surf1(xc.*rc+x3, yc.*rc+y3, zc.*rc+z3),
        plot3([x2 x3],[y2 y3],[z2 z3],'k','LineWidth',2);
        q4=a+b*3/2+(a+b)*(i-1);
        x4=r*cos(q4); y4=r*sin(q4); z4=rs+2*rs*(j-1);
        surf1(xc.*rc+x4, yc.*rc+y4, zc.*rc+z4),
        plot3([x3 x4],[y3 y4],[z3 z4],'k','LineWidth',2);
        g1=a/2+(a+b)*i;
        x5=r*cos(g1); y5=r*sin(g1); z5=2*rs*(j-1);
        plot3([x4 x5],[y4 y5],[z4 z5],'k','LineWidth',2);
        g2=a/2+(b+a)*i;
        x6=r*cos(g2); y6=r*sin(g2); z6=2*rs+2*rs*(j-1);
        plot3([x5 x6],[y5 y6],[z5 z6],'k','LineWidth',2);
        g3=a/2+b+(a+b)*(i-1);
        x7=r*cos(g3); y7=r*sin(g3); z7=2*rs+2*rs*(j-1);
    
```

```

plot3([x7 x3],[y7 y3],[z7 z3],'k','LineWidth',2);
    end
end
shading interp, colormap(gray),
axis('equal'),
axis off,

```

Результаты графического моделирования углеродной нанотрубки с зубчатой структурой представлены на рисунке 21.

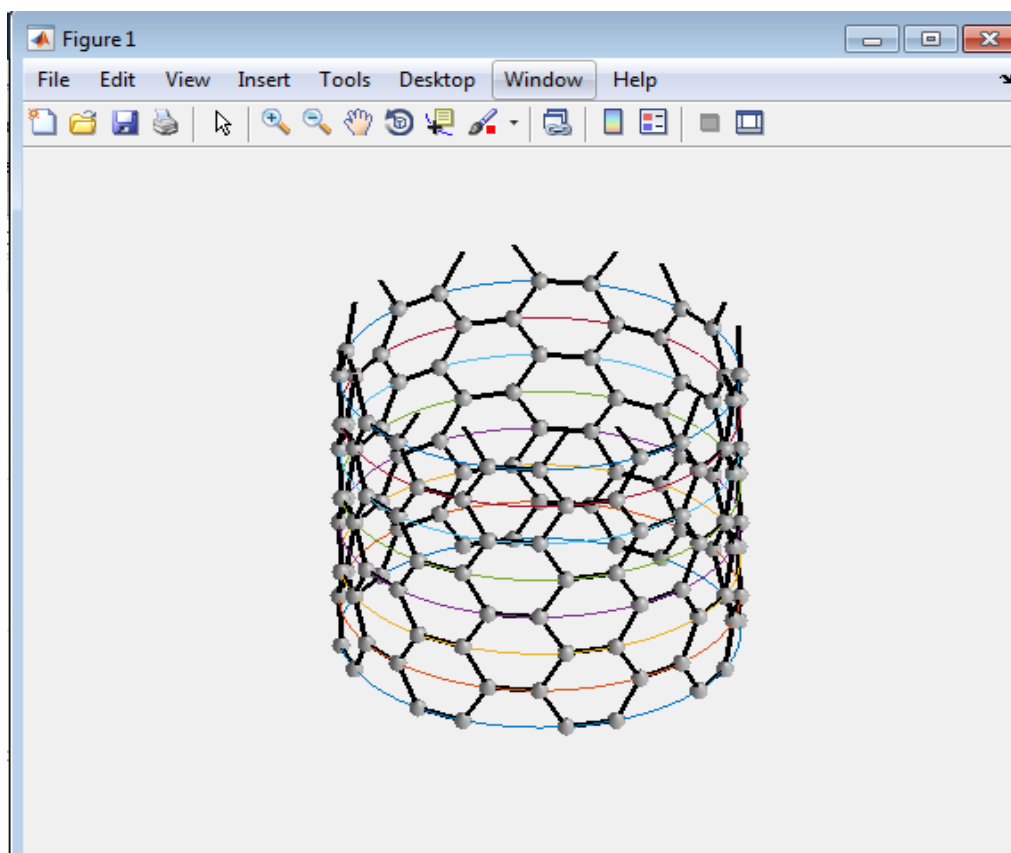


Рисунок 21 – Результаты графического вывода углеродной нанотрубки с зубчатой структурой

При визуализации наноструктуры, содержащей большое количество атомов, необходимо иметь детальную картину пространственного расположения атомов и их связей. Для более лучшего наглядного восприятия обычно изображают атомы в виде сфер, а химические связи между атомами в виде линий или цилиндров.

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата

Предложим следующие алгоритмы создания усовершенствованной и более детальной трехмерной модели визуализации атомных каркасов углеродных нанотрубок зигзагообразной и зубчатой структур.

Для начала рассмотрим алгоритм организации интерфейса пользователя и построения визуальной модели углеродной нанотрубки задаваемой им конфигурации.

Написание кода начинается со списка входных/выходных аргументов переменной длины. Переменная `varargin` позволяет объединить любое количество входных/выходных аргументов; она представляет собой массив ячеек, который содержит аргументы-опции вызываемой функции:

```
function varargout = task(varargin)
% TASK MATLAB code for task.fig
% TASK, by itself, creates a new TASK or raises the existing
% singleton.
% H = TASK returns the handle to a new TASK or the handle to
% the existing singleton.
% TASK('CALLBACK',hObject,eventData,handles,...) calls the local
% function named CALLBACK in TASK.M with the given input arguments.
% TASK('Property','Value',...) creates a new TASK or raises the
% existing singleton. Starting from the left, property value pairs are
% applied to the GUI before task_OpeningFcn gets called. An
% unrecognized property name or invalid value makes property application
% stop. All inputs are passed to task_OpeningFcn via varargin.
% *See GUI Options on GUIDE's Tools menu. Choose "GUI allows only one
% instance to run (singleton)".
% See also: GUIDE, GUIDATA, GUIHANDLES
% Edit the above text to modify the response to help task
% Last Modified by GUIDE v2.5 11-Apr-2018 15:00:38
% Begin initialization code - DO NOT EDIT
gui_Singleton = 1;
```

```

gui_State = struct('gui_Name',    mfilename, ...
                  'gui_Singleton', gui_Singleton, ...
                  'gui_OpeningFcn', @task_OpeningFcn, ...
                  'gui_OutputFcn', @task_OutputFcn, ...
                  'gui_LayoutFcn', [], ...
                  'gui_Callback', []);
if nargin && ischar(varargin{1})
    gui_State.gui_Callback = str2func(varargin{1});
end
if nargin
    [varargout{1:nargout}] = gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
else
    gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
end
% Executes just before task is made visible.
function task_OpeningFcn(hObject, eventdata, handles, varargin)
% This function has no output args, see OutputFcn.
% hObject handle to figure
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% varargin command line arguments to task (see VARARGIN)
set(handles.radiobutton1, 'Value', 1);
% Choose default command line output for task
handles.output = hObject;
% Update handles structure
guidata(hObject, handles);
% UIWAIT makes task wait for user response (see UIRESUME)
% uiwait(handles.btnclear);
% Outputs from this function are returned to the command line.
function varargout = task_OutputFcn(hObject, eventdata, handles)

```

```

% varargout cell array for returning output args (see VARARGOUT);
% hObject handle to figure
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Get default command line output from handles structure
varargout{1} = handles.output;

```

Для выбора определенной конфигурации углеродной нанотрубки на панели «Выбор типа архитектуры» расположены кнопки:

1) для углеродной нанотрубки с зигзагообразной структурой:

```

% Executes on button press in radiobutton1.
function radiobutton1_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to radiobutton1 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
set(handles.radiobutton2, 'Value', 0);
set(handles.radiobutton1, 'Value', 1);
% Hint: get(hObject,'Value') returns toggle state of radiobutton1

```

2) для углеродной нанотрубки с зубчатой структурой:

```

% Executes on button press in radiobutton2.
function radiobutton2_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to radiobutton2 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
set(handles.radiobutton1, 'Value', 0);
set(handles.radiobutton2, 'Value', 1);
% Hint: get(hObject,'Value') returns toggle state of radiobutton2

```

Панель «Число ячеек в кольце»:

```

function nrings_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to nrings (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB

```



```

% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Hints: get(hObject,'String') returns contents of nrings as text
% str2double(get(hObject,'String')) returns contents of nrings as a double
% Executes during object creation, after setting all properties.
function nrings_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to nrings (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles empty - handles not created until after all CreateFcns called
% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
% See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'),
get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

```

Панель «Число колец»:

```

function ncells_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to ncells (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Hints: get(hObject,'String') returns contents of ncells as text
% str2double(get(hObject,'String')) returns contents of ncells as a double
% Executes during object creation, after setting all properties.
function ncells_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to ncells (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles empty - handles not created until after all CreateFcns called
% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
% See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'),
get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))

```

					<i>BKP.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		65

```
set(hObject,'BackgroundColor','white');  
end
```

Внутренний диаметр, внешний диаметр, число атомов, масса трубки:

```
function edit6_Callback(hObject, eventdata, handles)  
% hObject handle to edit6 (see GCBO)  
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB  
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)  
% Hints: get(hObject,'String') returns contents of edit6 as text  
% str2double(get(hObject,'String')) returns contents of edit6 as a double  
% Executes during object creation, after setting all properties.
```

```
function edit6_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)  
% hObject handle to edit6 (see GCBO)  
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB  
% handles empty - handles not created until after all CreateFcns called  
% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.  
% See ISPC and COMPUTER.
```

```
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'),  
get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))  
set(hObject,'BackgroundColor','white');  
end
```

```
function edit7_Callback(hObject, eventdata, handles)  
% hObject handle to edit7 (see GCBO)  
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB  
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)  
% Hints: get(hObject,'String') returns contents of edit7 as text  
% str2double(get(hObject,'String')) returns contents of edit7 as a double  
% Executes during object creation, after setting all properties.
```

```
function edit7_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)  
% hObject handle to edit7 (see GCBO)  
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
```

```

% handles empty - handles not created until after all CreateFcns called
% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
% See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'),
get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

function edit8_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to edit8 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Hints: get(hObject,'String') returns contents of edit8 as text
% str2double(get(hObject,'String')) returns contents of edit8 as a double
% Executes during object creation, after setting all properties.
function edit8_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to edit8 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles empty - handles not created until after all CreateFcns called
% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
% See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'),
get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

function edit9_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to edit9 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
% Hints: get(hObject,'String') returns contents of edit9 as text
% str2double(get(hObject,'String')) returns contents of edit9 as a double

```

```

% Executes during object creation, after setting all properties.
function edit9_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to edit9 (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles empty - handles not created until after all CreateFcns called
% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
% See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'),
get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

```

Кнопка «Построить»:

```

% Executes on button press in build.
function build_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to build (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
cla('reset');
set(handles.build, 'Enable', 'off');
shading interp, colormap(gray),
axis('equal'),
axis off,
drawnow

```

Кнопка «Очистить»:

```

% Executes on button press in btnclear.
function btnclear_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to btnclear (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)
cla

```



```

x2=r*cos(q2); y2=r*sin(q2); z2=2*rs*(j-1);
surfl(xc.*rc+x2, yc.*rc+y2, zc.*rc+z2),
plot3([x1 x2],[y1 y2],[z1 z2],'k','LineWidth',2);
q3=a+b/2+(a+b)*(i-1);
x3=r*cos(q3); y3=r*sin(q3); z3=rs+2*rs*(j-1);
surfl(xc.*rc+x3, yc.*rc+y3, zc.*rc+z3),
plot3([x2 x3],[y2 y3],[z2 z3],'k','LineWidth',2);
q4=a+b*3/2+(a+b)*(i-1);
x4=r*cos(q4); y4=r*sin(q4); z4=rs+2*rs*(j-1);
surfl(xc.*rc+x4, yc.*rc+y4, zc.*rc+z4),
plot3([x3 x4],[y3 y4],[z3 z4],'k','LineWidth',2);
g1=a/2+(a+b)*i;
x5=r*cos(g1); y5=r*sin(g1); z5=2*rs*(j-1);
plot3([x4 x5],[y4 y5],[z4 z5],'k','LineWidth',2);
g2=a/2+(b+a)*i;
x6=r*cos(g2); y6=r*sin(g2); z6=2*rs+2*rs*(j-1);
plot3([x6 x4],[y6 y4],[z6 z4],'k','LineWidth',2);
g3=a/2+b+(a+b)*(i-1);
x7=r*cos(g3); y7=r*sin(g3); z7=2*rs+2*rs*(j-1);
plot3([x7 x3],[y7 y3],[z7 z3],'k','LineWidth',2);
end

```

$N = 4 * m * n;$

$M = N / 1.66 * 10.^{-27};$

$R_{in} = r - 0.773;$

$R_{out} = r + 0.773;$

Построение «Электронной структуры» для углеродной нанотрубки типа «ЗИГЗАГ»:

else

$n = \text{str2double}(\text{get}(\text{handles.ncells}, 'String'));$ % число ячеек в кольце

$s = \text{str2double}(\text{get}(\text{handles.nrings}, 'String'));$ % число колец в трубке

```

rcc=1.42; % длина химической связи
rs=rcc*3^.5; % расстояние между соседними ячейками
bdep = get(handles.checkbox3, 'Value')
if bdep == 0;
rc=0.250; % радиус
else rc=0.773; % ковалентный радиус частицы
end
r=rs/(2*sin(pi/n)); % радиус описанной окружности
[xc,yc,zc]=sphere;
t=0:0.01:2*pi;
for d=0:3*rcc:3*rcc*s;
    for i=1:2:2*n+1
        x(i)=r*cos(pi/n*(i-1));
        y(i)=r*sin(pi/n*(i-1));
        z(i)=d;
        surf(xc.*rc+x(i),yc.*rc+y(i),zc.*rc+z(i)), hold on,
        x(i+1)=r*cos(pi/n*(i-1)+pi/(n));
        y(i+1)=r*sin(pi/n*(i-1)+pi/(n));
        z(i+1)=d+rcc/2;
        surf(xc.*rc+x(i+1),yc.*rc+y(i+1),zc.*rc+z(i+1)),
    end
    plot3(x,y,z,'k','LineWidth',2)
    for i=1:2:2*n+1
        x(i)=r*cos(pi/n*(i-1)+pi/(n));
        y(i)=r*sin(pi/n*(i-1)+pi/(n));
        z(i)=d+rcc/2;
        x(i+1)=r*cos(pi/n*(i-1)+pi/(n));
        y(i+1)=r*sin(pi/n*(i-1)+pi/(n));
        z(i+1)=d+3/2*rcc;
        plot3([x(i),x(i+1)], [y(i),y(i+1)], [z(i),z(i+1)],'k','LineWidth',2)

```

```

end
for i=1:2:2*n+1
    x(i)=r*cos(pi/n*(i-1)+pi/(n));
    y(i)=r*sin(pi/n*(i-1)+pi/(n));
    z(i)=d+3/2*rcc;
    surf(xc.*rc+x(i),yc.*rc+y(i),zc.*rc+z(i)),
    x(i+1)=r*cos(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    y(i+1)=r*sin(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    z(i+1)=d+2*rcc;
    surf(xc.*rc+x(i+1),yc.*rc+y(i+1),zc.*rc+z(i+1)),
end
plot3(x,y,z,'k','LineWidth',2)
for i=1:2:2*n+1
    x(i)=r*cos(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    y(i)=r*sin(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    z(i)=d+2*rcc;
    x(i+1)=r*cos(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    y(i+1)=r*sin(pi/n*(i-1)+2*pi/(n));
    z(i+1)=d+3*rcc;
    plot3([x(i),x(i+1)], [y(i),y(i+1)], [z(i),z(i+1)],'k','LineWidth',2)
end
N = 4*s*n;
M = N / 1.66*10.^(-27);
Rin = r - 0.773;
Rout = r + 0.773;
end
catch
    set(handles.build, 'Enable', 'on');
    drawnow
    shading interp, colormap(gray),

```

					<i>BKP.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		72


```

axis('equal'),
axis off,
return
end
shading interp, colormap(gray),
axis('equal'),
axis off,
rotate3d on;
set(handles.nAtoms, 'String', N);
set(handles.mTube, 'String', M);
set(handles.RRint, 'String', Rin);
set(handles.RRout, 'String', Rout);
set(handles.build, 'Enable', 'on')

```

Результаты графического вывода углеродной нанотрубки разной конфигурации представлены на рисунках 22 - 25.

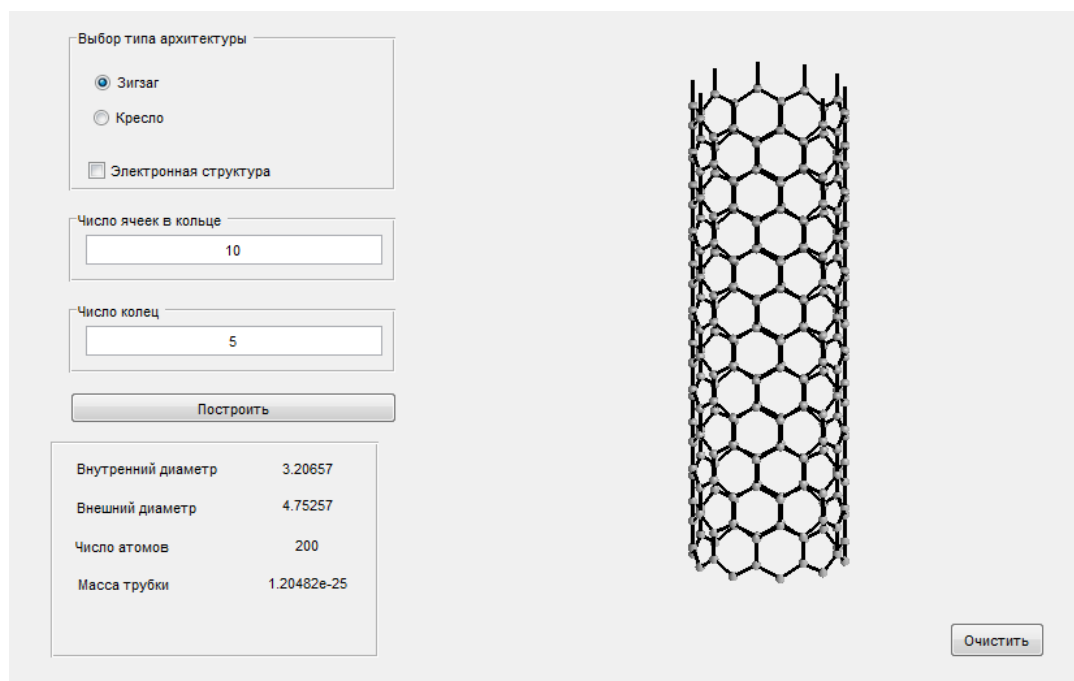


Рисунок 22 – Результаты графического вывода углеродной нанотрубки с зигзагообразной структурой

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата

ВКР.165638.09.04.01.ПЗ

Лист

73

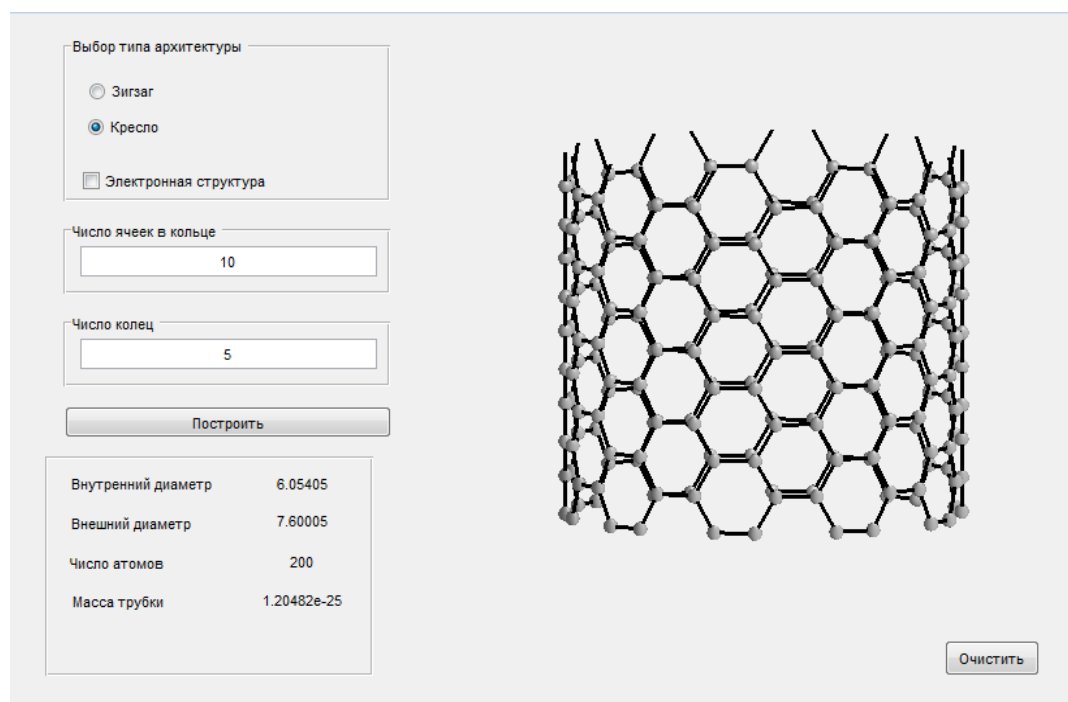


Рисунок 23 – Результаты графического вывода углеродной нанотрубки с зубчатой структурой

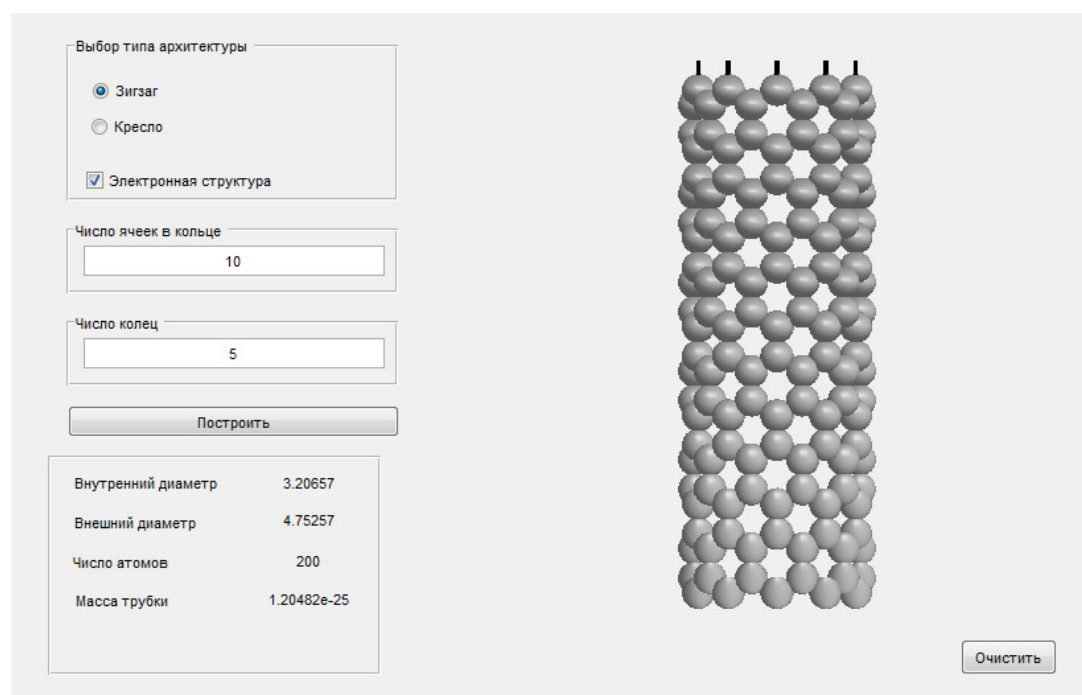


Рисунок 24 – Результаты графического вывода углеродной нанотрубки тип «зигзаг» электронной структуры

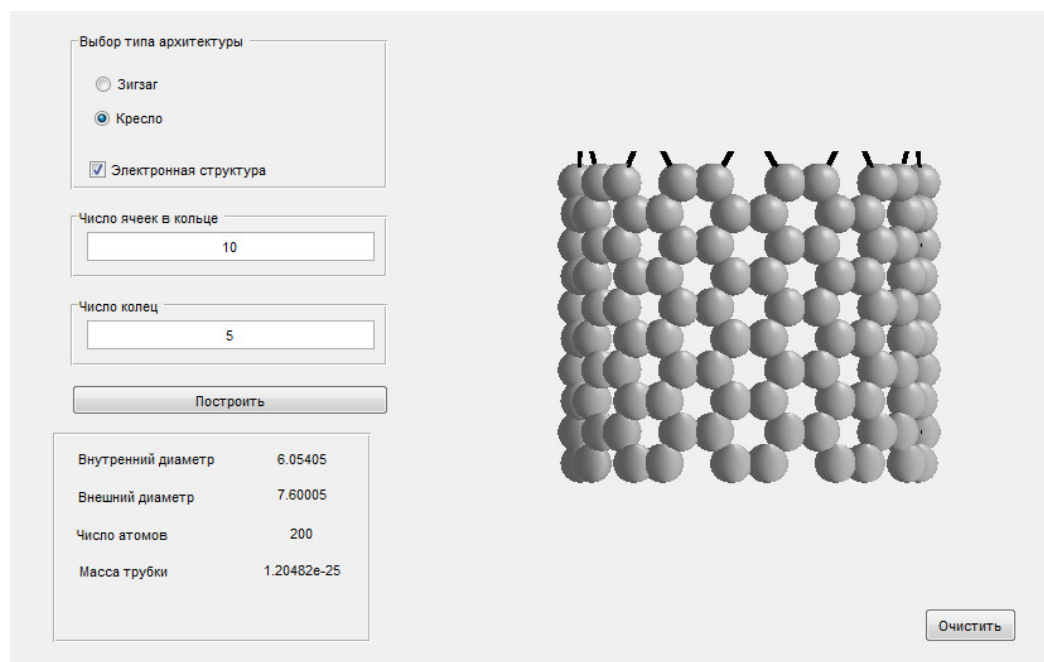


Рисунок 25 – Результаты графического вывода углеродной нанотрубки типа «кресло» электронной структуры

Таким образом, программно-алгоритмические средства визуализации ахиральных углеродных нанотрубок можно рассматривать как удобный инструмент, позволяющий всесторонне исследовать нанообъекты, а затем на их основе проектировать и создавать различные материалы с требуемыми характеристиками.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящее время, развитие современных нанотехнологий является неотъемлемой частью успешного развития всех сфер человеческой деятельности. Успех в развитии основан в разработке надежных способов создания наноматериалов с задаваемыми свойствами, и развитие существующих методов нанодиагностики с атомным разрешением.

Визуализация структур на атомистическом уровне, как при формировании заданий, так и при анализе результатов теоретических исследований нанобъекта есть необходимый инструмент, который позволяет не только соединять разные уровни моделирования, но и сравнивать полученные результаты этих исследований с известными экспериментальными свойствами наноразмерных объектов. Кроме того, графическое отображение атомно-молекулярной структуры ахиральных углеродных нанотрубок (в первую очередь, взаимного расположения ядер атомов в пространстве, но также и характеристик электронного строения системы) позволяет визуализировать области наиболее значительных изменений структуры и электронных характеристик в ходе тех или иных физических или химических процессов.

В работе проведен анализ существующих программных средств, ориентированных на исследования нанобъектов. Приведено обоснование выбора среды разработки программы. Трехмерные модели визуализации атомных каркасов углеродных наноструктур на основе предложенных алгоритмов реализованы с помощью графических средств математического пакета MATLAB. Он по сравнению с традиционными языками программирования позволяет на порядок сократить время решения типовых задач и значительно упрощает разработку новых алгоритмов, благодаря обширной библиотеки функций.

Полученные результаты в ходе работы могут быть использованы для моделирования структурных характеристик углеродосодержащих материалов, что позволит исследовать нанобъекты и в дальнейшем на их основе проектировать и создавать материалы с требуемыми характеристиками.

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		76

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1 Аллотропия // Большой Энциклопедический словарь [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://dic.academic.ru/dic/nsf/enc3p/52190>. – 29.11.2017.

2 Алфимов, М.В. Многомасштабный компьютерный дизайн материалов для оптических хемосенсоров на основе фотонных кристаллов / М.А. Алфимов [и др.] // Российские нанотехнологии. – 2010. – № 3-4. – С. 84-91.

3 Анищик, В.М. Наноматериалы и нанотехнологии / В.М. Анищик, В.Е. Борисенко, Н.К. Толочко. – Минск: Изд. центр. БГУ, 2008. – 375 с.

4 Артюхов, В.И. Компьютерное моделирование физико-химических свойств наноструктур на основе диоксида кремния и углерода: автореф. дис. ...канд. физ.-мат. наук / В.И. Артюхов. – Москва, 2010. – 22 с.

5 Бабичев, А.В. Автоматизация построения моделей и визуализация результатов численного моделирования деформирования наноструктур / А.В. Бабичев // Вычислительная механика сплошных сред. – 2008. – № 4. – С. 21-27.

6 Бадриев, И.Б. Разработка графического пользовательского интерфейса в среде MATLAB / И.Б. Бадриев, В.В. Бандеров, О.А. Задворнов. – Казань: Казанский гос. ун-т, 2010. – 113 с.

7 Бакеева, И.В. Наноструктуры: основные понятия, классификация, способы получения / И.В. Бакеева. – М.: МИТХТ им. М.В. Ломоносова, 2008. – 68 с.

8 Барабанова, А.П. Актуальность разработок и внедрения в современную науку углеродных нанотрубок. Область их применения / А.П. Барабанова, Т.В. Люмина // Энергетические и электротехнические системы. Международный сборник научных трудов. Под ред. С.И. Лукьянова, Н.В. Швидченко. Издательство: Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова (Магнитогорск), 2015. – С. 58-62.

9 Беленков, Е.А. Наноалмазы и родственные углеродные наноматериалы. Компьютерное материаловедение / Е.А. Беленков, В.В. Ивановская, А.Л. Ивановский. – Екатеринбург: УрО РАН, 2008. – 169 с.

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		77

10 Беринский, И.Е. Моделирование межатомных взаимодействий в графене с применением линейной теории стержней / И.Е. Беринский // Вестник Нижегородского ун-та им. Н.И. Лобачевского. – 2011. – № 4. – С. 388-390.

11 Бочкарева, Л.В. Компьютерное моделирование свойств материалов, укрепленных углеродными нанотрубками / Л.В. Бочкарева, Д.М. Санникович // Доклады БГУИР. – 2007. – № 3. – С. 68-73.

12 Браже, Р.А. Математическое моделирование наноструктур и их физических свойств: учебное пособие / Р. А. Браже. – Ульяновск: УлГТУ, 2014. – 98 с.

13 Бреднихина, А.Ю. Графические средства для научной визуализации в кристаллографии / А.Ю. Бреднихина, В.А. Дебелов // Вестник НГУ. Серия: Информационные технологии. – 2009. Т.7, вып. 3. – С.45-61.

14 Глухова, О.Е. Программный комплекс для наноэлектроники / О.Е. Глухова, Р.Ю. Жничков, М.М. Слепченков // Нано- и микросистемная техника – 2011. – № 1. – С. 5-11.

15 Грибачев, В. Технология получения и сферы применения углеродных нанотрубок / В. Грибачев // Компоненты и технологии. – 2008. – № 12. – С. 135-138.

16 Григорьев, Ф.В. Методы молекулярного моделирования супрамолекулярных комплексов: иерархический подход / Ф.В. Григорьев // Российские нанотехнологии. – 2010. – № 5-6. – С. 47-53.

17 Данилов, С.В. Моделирование атомной структуры и рентгеноструктурный анализ углеродных нанотрубок: Дис. канд. физ.-мат. наук. / С.В. Данилов. – Петрозаводск, 2013. – 188 с.

18 Дьяконов, А.Г. Среда для вычислений и визуализации MatLab: учеб. пособие [Электронный ресурс] / А.Г. Дьяконов. – М.: МГУ, 2010. – Режим доступа: www.exponenta.ru – 15.11.2017.

19 Елецкий, А.В. Углеродные нанотрубки / А.В. Елецкий // Успехи физических наук. – 1997. – № 9. – С. 945- 972.

20 Еремин, И.Е., Подолько, Е.А., Халецкая, Т.В. Моделирование угле-

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		78

родной нанотрубки со структурой типа «Зигзаг». Материалы Российской национальной научной конференции с международным участием (22 декабря 2017 г.). – Благовещенск, 2017. – Часть I. – С. 8-10.

21 Запороцков, П.А. Полупроводящие модифицированные структуры на основе углеродных нанотрубок: Дис. канд. физ.-мат. наук / П.А. Запороцков. – Москва, 2016. – 155 с.

22 Ивановская, В.В. Компьютерное моделирование новых нанотрубок и прогноз их функциональных свойств / В.В. Ивановская, А.Н. Еняшин, Ю.Н. Иакурин, А.Л. Ивановский // Нанотехника. – Издательство: Концерн «Наноиндустрия» (Москва), 2006. – № 5. – 126-140.

23 Караваев, А.В. Моделирование углеродных наноструктур методом молекулярной динамики / А.В. Караваев, В.П. Бескачко. // Вестник ЮУрГУ. – 2003. – № 8. – С. 112-121.

24 Карнет, Ю.Н. Компьютерное моделирование механических свойств углеродных наноструктур / Ю.Н. Карнет // Изв. РАН. МТТ. – 2010. – № 4. – С. 121-137.

25 Кувыркин, Г.Н. Математическое моделирование механических характеристик и взаимодействий углеродных нанотрубок / Г.Н. Кувыркин, Н.Н. Головин // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2011. – № 4 (2). – С. 478-480.

26 Латышев, А.Ю. Транспортные свойства углеродных наноструктур на основе графита и многостенных нанотрубок: Дис. канд. физ.-мат. наук / А.Ю. Латышев. – Москва, 2009. – 98 с.

27 Лобанов, И.С. Рассеяние на стыке нанотрубок «зигзаг» и «кресло» / И.С. Лобанов, И.Ю. Попов // Наносистемы: физика, химия, математика. Санкт-петербург. – 2012. – № 3 (2). – С. 6-28.

28 Макунин, А.В. Полимер-наноуглеродные композиты для космических технологий. Ч.1. Синтез и свойства наноуглеродных структур: учеб. пособие / А. В. Макунин, Н. Г. Чеченин. – М.: Университетская книга, 2011. – 150 с.

29 Мартынов, Н.Н. MATLAB 6.5. Вычисления, визуализация, программирование / Н.Н. Мартынов, А.П. Иванов. – М.:КУДИЦ-ОБРАЗ, 2007. – 336 с.

30 Матвеева, А.Н. Моделирование структуры образца, содержащего углеродные нанотрубки / А.Н. Матвеева, К.И. Боржова // Наноматериалы и нанотехнологии: проблемы и перспективы: сб. материалов V Междунар. науч. конф. для молодых ученых, студентов и школьников. – Саратов: Сарат. гос. техн. ун-т, 2016. – 154 с.

31 Матюшкин, И.В. Моделирование и визуализация средствами MATLAB физики наноструктур / И.В. Матюшкин. – М.: Техносфера, 2011. – 168 с.

32 Михайлов, И.С. О программном обеспечении моделирования нанообъектов / И.С. Михайлов // Современные проблемы науки и образования [Электронный ресурс]. – 2011. – № 3. – Режим доступа: <http://www.science-education.ru/97-4691>. – 18.012.2017.

33 Назаренко, Н.В. Компьютерное моделирование атомного каркаса углеродных наноструктур / Н.В. Назаренко, И.Е. Еремин, А.А. Остапенко // Электронное научное издание «Ученые заметки ТОГУ». – 2012. – Том 3. – № 2. – С. 8-16.

34 Назаренко, Н.В. Программная визуализация углеродных наноструктур / Н.В. Назаренко, И.Е. Еремин // Образовательная среда вуза: ресурсы, технологии: материалы региональной науч.-практ. конф. с межрегиональным и международным участием – Благовещенск: БГПУ, 2012. – С. 66-67.

35 Пасько, А.А. Научная визуализация и ее применение в исследованиях наноструктур [Электронный ресурс] / А.А. Пасько, В.В. Пилюгин – Режим доступа: http://85.142.23.144/packages/mifi/FAAE2D15-986F-4357-BADE-C0CA5CDDA01A/1.0.0.0/Pasko_Pilyugin_rus.pdf – 19.02.2018.

36 Поленов, Ю.В. Физико-химические основы нанотехнологий: учеб. пособие / Ю.В. Поленов, М.В. Лукин, Е.В. Егорова. Иван. гос. хим.-технол. ун-т.-Иваново, 2013. – 196 с.

37 Стриханов, М.Н. Компьютерная визуализация наноструктур / М.Н.

					<i>ВКР.165638.09.04.01.ПЗ</i>	<i>Лист</i>
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подпись</i>	<i>Дата</i>		80

Стриханов, Н.Н. Дегтяренко, В.В. Пилюгин, Е.Е. Маликова, Н.А. Матвеева, В.Д. Аджиев, А.А. Пасько // Российские нанотехнологии. – Издательство: Паркмедиа (Москва), 2010. – Т. 5. – № 5-6. – С. 12-13.

38 Сухно, И.В. Углеродные нанотрубки : Учебное пособие / И.В. Сухно, В.Ю. Бузько. Часть I. Высокотехнологичные приложения. – Краснодар: КубГУ, 2008. – 55 с.

39 Усанов, Д.А. Компьютерное моделирование наноструктур : Учебное пособие / Д.А. Усанов, Ал.В Скрипаль, Ан.В. Скрипаль, А.В. Абрамов. – Саратов, 2013. – 100 с.

40 Хайдаров, Г.Г. Компьютерные технологии трехмерного моделирования: учеб. пособие / Хайдаров Г.Г., Тозик В.Т. – СПб.: СПбГУ ИТМО, 2010. – 80 с.

41 Халецкая, Т.В. Компьютерное моделирование ахиральных углеродных нанотрубок. Молодёжь XXI века: шаг в будущее : материалы XVIII региональной научно-практической конференции (18 мая 2017 года). – Благовещенск: Изд-во БГПУ, 2017. – С. 1059-1060.

42 Халецкая, Т.В. Компьютерное моделирование ахиральных углеродных нанотрубок в медицине. Материалы XI международной научной конференции «Системный анализ в медицине» (САМ 2017) / под общ. ред. В.П.Колосова, (19-20 октября 2017 г.). – Благовещенск, 2017. – С. 55-57.

43 Шашок, Ж. С. Применение углеродных наноматериалов в полимерных композициях / Ж. С. Шашок, Н. Р. Прокопчук. – Минск : БГТУ, 2014. – 232 с.