

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 09.04.04 – Программная инженерия
Направленность (профиль) образовательной программы: Управление разработкой программного обеспечения

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ
Зав. кафедрой
_____ А.В. Бушманов
«_____» _____ 2025 г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

на тему: Компьютерное моделирование ахиральных углеродных нанотрубок

Исполнитель студент группы 3105-ом1	_____	Д.В. Бурдуковский
	(подпись, дата)	
Руководитель доцент, канд. физ.-мат. наук	_____	В.В. Ерёмина
	(подпись, дата)	
Руководитель научного содержания программы магистратуры профессор, доктор техн. наук	_____	И.Е. Ерёмин
	(подпись, дата)	
Нормоконтроль инженер кафедры	_____	В.Н. Адаменко
	(подпись, дата)	
Рецензент доцент кафедры Математи- ческого анализа и модели- рования, канд. техн. наук	_____	Т.В. Труфанова
	(подпись, дата)	

Благовещенск, 2025

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

Институт компьютерных и инженерных наук
Кафедра информационных и управляющих систем

УТВЕРЖДАЮ
Зав. кафедрой
_____ А.В. Бушманов
«___» _____ 2025 г.

З А Д А Н И Е

К магистерской диссертации студента группы 3105–ом1

Бурдуковского Данила Витальевича

1. Тема магистерской диссертации: _____

Компьютерное моделирование ахиральных углеродных нанотрубок

(Утверждено приказом от 06.03.25 № 609-уч)

2. Срок сдачи студентом законченной работы (проекта): 10.06.2025

3. Исходные данные к магистерской диссертации: отчёт о прохождении пред-
дипломной практики

4. Содержание магистерской диссертации (перечень подлежащих разработке
вопросов): описание предметной области, разработка математических моделей и
алгоритмов, программная реализация, решение задачи.

5. Перечень материалов приложения (наличие чертежей, таблиц, графиков,
схем, программных продуктов, иллюстративного материала и т.п.): _____

6. Рецензент магистерской диссертации: _____

7. Дата выдачи задания 29.01.25

8. Руководитель выпускной квалификационной работы: _____

В.В. Ерёмина, доцент, канд. физ.-мат. наук

(фамилия, имя, отчество, должность, уч.степень, уч.звание)

Заявление принял к исполнению _____

РЕФЕРАТ

Магистерская диссертация содержит 92 с., 31 рисунков, 2 таблицы, 41 источник.

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

Углеродные нанотрубки занимают особое положение среди современных наноматериалов благодаря исключительным физико-химическим характеристикам. Их потенциальные области применения непрерывно расширяются, что стимулирует активную разработку специализированного программного обеспечения для анализа и моделирования подобных структур. Однако даже при наличии обширного экспериментального материала многие аспекты атомного строения этих объектов требуют дальнейшего изучения.

В данной ситуации особую значимость приобретают теоретические методы, позволяющие с высокой точностью моделировать структуру и свойства наноматериалов. Компьютерное моделирование выступает незаменимым инструментом, восполняющим пробелы экспериментальных исследований. Особое место в этом процессе занимает визуализация, которая дает возможность анализировать не только пространственное расположение атомов, но и особенности распределения электронной плотности.

В рамках настоящего исследования разработаны и реализованы в среде MATLAB алгоритмы трехмерного отображения атомной структуры наноматериалов. Созданный инструментарий позволяет проводить детальный анализ нанообъектов на атомарном уровне, что открывает новые возможности для фундаментальных и прикладных исследований в области нанотехнологий.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	7
1 Общая характеристика углеродных наноматериалов	10
1.1 Классификация углеродных наноматериалов	10
1.2 Структура углеродных нанотрубок	24
2 Моделирование структуры ахиральных нанотрубок	33
2.1 Построение математических моделей атомной структуры наноматериалов	33
2.2 Модельный подход к описанию нанотрубок типа «зигзаг»	42
2.3 Модельный подход к описанию нанотрубок типа «кресло»	49
2.4 Общий алгоритм построения математических моделей ахиральных углеродных нанотрубок	53
3 Разработка программного средства визуализации нанотрубок	59
3.1 Анализ существующих программных решений в области визуализации наноструктур	59
3.2 Архитектура и функциональные возможности разработанной программы	63
3.3 Средства и инструменты, использованные при создании программного продукта	66
Заключение	87
Библиографический список	88

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.

ВВЕДЕНИЕ

Современное развитие науки и техники сопровождается постоянным поиском новых материалов, обладающих особыми свойствами. В этом контексте наноматериалы и нанокомпозиты – вещества, содержащие наноструктурные включения или полностью построенные из элементов наноразмерного масштаба – выдвигаются на передний план. Их высокая прочность, устойчивость к деформациям и трещинообразованию, а также уникальные механические и физические характеристики делают их особенно привлекательными для высокотехнологичных отраслей промышленности.

Особое внимание уделяется углеродным наноматериалам, в первую очередь углеродным нанотрубкам. Эти структуры представляют собой одно- или многослойные цилиндрические образования с графитоподобной атомной решёткой, свернутой в трубку. Благодаря своей прочности, высокой теплопроводности и электрическим свойствам, они находят применение в электронике, материаловедении, биомедицине и даже аэрокосмической отрасли. Однако несмотря на активные экспериментальные исследования, детальное понимание их внутреннего строения и закономерностей формирования всё ещё требует значительных усилий. Сложность экспериментов в наномасштабе и высокая стоимость специализированного оборудования делают теоретические методы и моделирование особенно востребованными.

Исследования наноматериалов невозможны без глубокого понимания их атомной и электронной структуры. Здесь ключевым становится подход, основанный на научной визуализации – создании графических моделей, отображающих пространственное распределение атомов и связанных с ними физических параметров. Такая визуализация позволяет не только интерпретировать результаты расчетов, но и прогнозировать свойства еще не синтезированных наноструктур.

Актуальность настоящего исследования определяется необходимостью в

точных, воспроизводимых и адаптивных алгоритмах для моделирования и визуализации углеродных нанотрубок – в частности, ахиральных конфигураций, которые характеризуются упорядоченной, симметричной структурой атомной решётки. Построение трёхмерных моделей таких объектов требует строгого математического описания и эффективных алгоритмов, способных учитывать геометрию и топологию наноструктур.

Цель данной работы – разработка алгоритмов визуализации и программной реализации трёхмерных моделей ахиральных углеродных нанотрубок, основанных на математически выверенных представлениях об их атомной структуре. В рамках поставленной цели были решены следующие задачи:

- проанализирована геометрия и пространственная организация углеродных нанотрубок;
- разработаны математические модели и алгоритмы генерации координат атомов в каркасе ахиральных нанотрубок;
- создан программный комплекс в среде MATLAB, обеспечивающий автоматизированное построение и визуализацию трёхмерных моделей.

Научная новизна работы заключается в разработке универсального алгоритма формирования атомного каркаса нанотрубок заданной конфигурации, а также в подходе к определению их физических параметров на основе атомных координат. Это открывает путь к высокоточной визуализации и моделированию свойств наноструктур, что особенно важно на этапе проектирования новых материалов.

Практическая ценность результатов заключается в возможности интеграции разработанных алгоритмов в исследовательские системы, ориентированные на наноматериаловедение. Представленные решения позволяют автоматизировать процесс построения наноструктур, обеспечивая гибкость, масштабируемость и наглядность моделирования.

В качестве защищаемых положений выносятся:

- алгоритм генерации координат атомного каркаса ахиральной углерод-

ной нанотрубки с различными геометрическими параметрами. Алгоритм основан на преобразовании двумерной гексагональной решётки графена в трёхмерную цилиндрическую поверхность с учётом индексов свёртки, длины, радиуса и шага периодичности. Особенностью является высокая точность геометрических преобразований и возможность масштабирования под трубки различной конфигурации и размера. Алгоритм обеспечивает основу для дальнейшего численного моделирования, в том числе с учётом дефектов и неоднородностей;

- методика вычисления физических характеристик нанотрубки на основе параметров её атомной структуры. Предлагаемый подход позволяет определить ключевые свойства, включая диаметр, длину, плотность атомов, межатомные расстояния и число элементарных ячеек. Также возможна оценка механических параметров (прочности, гибкости) на основе анализа симметрии, структуры и топологии атомного каркаса. Методика служит мостом между геометрическим моделированием и инженерной интерпретацией свойств нанотрубок;

- программный комплекс, реализующий визуализацию и автоматизированный расчёт структурных параметров ахиральных углеродных нанотрубок с возможностью адаптации под иные типы наноструктур. Система разработана в среде MATLAB и включает модули построения атомной модели, расчёта параметров и трёхмерной графической визуализации. Архитектура комплекса поддерживает расширение для моделирования других классов углеродных наноструктур, таких как многослойные нанотрубки, графеновые фрагменты и фуллерены, что делает его универсальным инструментом для научных и учебных целей.

1 ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

1.1 Классификация углеродных наноматериалов

Сегодня нанотехнологии играют важнейшую роль в научно-техническом развитии, трансформируя ключевые сферы жизни – от промышленности и медицины до ИТ, экологии и обороны. Исследования в области нанообъектов (менее 100 нм) перешли от теории к практическому применению, обеспечивая доступ к материалам с уникальными свойствами.

Наноматериалы, обладая высокой удельной поверхностью, прочностью и проявлением квантовых эффектов, стали основой для создания новых типов конструкционных и функциональных материалов. Ведущие страны уже производят тысячи тонн таких веществ ежегодно, что подтверждает переход от лабораторных экспериментов к промышленным технологиям. Вместе с тем усиливается потребность в глубоком понимании их структуры, поскольку ключевые свойства формируются именно на атомарном уровне.

Идеи о наноматериалах и веществах в наносостоянии начали формироваться ещё в середине XX века. В 1959 году Ричард Фейнман в своей знаменитой лекции отметил потенциал исследований в области малых масштабов, предположив, что управление материей на уровне атомов и молекул может вызвать научную революцию.

Термин «нанотехнология» впервые ввёл Норио Танигути в 1974 году, обозначив область обработки материалов на нанометровом уровне. В 1981 году Герберт Глейтер предложил понятие «нанокристаллические материалы» для описания ультрамелкозернистых металлов. С тех пор получили широкое распространение и другие термины: «нанофазные», «наноструктурные», «нанокомпозитные» материалы, ставшие неотъемлемой частью современной научной терминологии.

Наноматериалы представляют собой класс веществ, в которых хотя бы один из структурных элементов имеет размер менее 100 нанометров. Именно

такие размеры обуславливают появление у этих материалов новых качественных свойств, отличающихся от характеристик макроскопических аналогов. Благодаря этому наноматериалы приобретают высокую функциональность и уникальные эксплуатационные параметры, что делает их особенно перспективными для применения в науке и технике.

Как было отмечено на 7-й Международной конференции по нанотехнологиям (Висбаден, 2004 г.), к наноматериалам относят широкий спектр структур, различающихся по форме, составу и назначению. Среди них – нанопористые материалы, обладающие развитой внутренней поверхностью; наночастицы, характеризующиеся высокой удельной поверхностью и активностью; нанотрубки и нановолокна, отличающиеся высокими механическими и проводящими свойствами; нанодисперсии и коллоидные системы, применяемые в медицине и химии; наноструктурированные поверхности и тонкие плёнки, используемые в электронике и сенсорике; а также нанокристаллы и нанокластеры, демонстрирующие квантовые эффекты и нестандартные оптические свойства.

В настоящее время в научном сообществе не существует единой, общепринятой терминологии и классификации наноматериалов, основанной исключительно на размере их структурных компонентов. Однако в последние годы всё чаще проводится разграничение между геометрической и физической размерностью наночастиц, что позволяет точнее описывать их свойства и поведение.

С учетом этого подхода, наноматериалы условно разделяют на четыре основные группы (таблица 1), каждая из которых отличается характером размерности и типом наноструктурных элементов. Такой способ классификации способствует более глубокому пониманию особенностей формирования, функционирования и применения наноструктур в различных технологических и исследовательских задачах.

Таблица 1 – Классификация наноматериалов

Категория	Подкатегория / Характеристика	Примеры
Наноматериалы		
Наноизделия (≤ 100 нм)		– нанопорошки – нанопроволоки – нановолокна – тонкие пленки – нанотрубки
Микроизделия ($\leq 1\text{--}2$ мм)		– проволоки – ленты – фольги
Массивные наноматериалы ($> 1\text{--}2$ мм)	Однофазные (микроструктурно однородные)	– стёкла – гели – пересыщенные твёрдые растворы
	Многофазные (микроструктурно неоднородные)	– сложные сплавы – разные виды керамики
Композиты с компонентами из наноматериалов	С наноизделиями	– с наночастицами – с нановолокнами – с иономодифицированной поверхностью
	С микроизделиями	– с наноструктурными волокнами и/или частицами – с наноструктурными покрытиями или слоями
	Со сложным сочетанием компонентов	

К первой категории принадлежат твердотельные материалы, у которых хотя бы один из пространственных параметров не превышает 100 нанометров. Такие структуры демонстрируют принципиально новые свойства, отличающие их от объемных аналогов. Типичными представителями этой группы являются нанопорошки с контролируемым распределением частиц по размерам, ультратонкие пленки суб-100 нм толщины, а также протяженные одномерные структуры в виде нановолокон и углеродных нанотрубок.

Данные материалы могут иметь различную степень структурной сложности: от единичного кристаллита (в случае наночастиц) до нескольких слоёв

в тонкоплёночных материалах. В связи с этим данную группу часто рассматривают как наноматериалы с ограниченным числом структурных единиц либо как материалы, реализованные в форме законченных нанообъектов – так называемых наноизделий.

Вторая категория наноматериалов включает компактные изделия, размеры которых находятся в диапазоне от 1 мкм до 1 мм. Это, как правило, проволоки, металлические ленты, тончайшая фольга и аналогичные объекты. Характерной чертой таких материалов является наличие большого количества кристаллитов, что позволяет отнести их к микроизделиям с развитой внутренней наноструктурой.

Третью группу составляют объемные наноматериалы, размеры которых превышают несколько миллиметров. Несмотря на видимую макроформу, они состоят из огромного числа наноразмерных структурных единиц – чаще всего это кристаллиты с характерным размером от 1 до 100 нм. Подобные материалы рассматриваются как поликристаллические системы с выраженной наноструктурной организацией.

В рамках этой группы выделяют два структурных типа. Первый представляет собой материалы с микроструктурной однородностью, где изменения происходят преимущественно на атомарном уровне. К ним относят, например, аморфные вещества, гели и переуплотнённые растворы – они нередко характеризуются метастабильными состояниями. Второй тип охватывает микроструктурно неоднородные материалы, в которых присутствуют наноразмерные фрагменты, различающиеся по фазовому состоянию или химическому составу. Примером служат многофазные композиции, такие как наноструктурированные сплавы сложного состава.

Обе эти группы, в зависимости от подхода, могут быть отнесены к более узкому понятию нанокристаллических или нанофазных материалов, подчеркивающему структурную специфику на наноуровне.

Четвёртая группа включает композиционные материалы, содержащие

нанокomпоненты в виде наночастиц, нановолокон или наноструктурированных поверхностей. Такие элементы могут относиться как к первой, так и ко второй группе наноматериалов. Примеры включают композиты, усиленные наночастицами, изделия с ионно-модифицированной поверхностью или тонкоплёночными покрытиями. Также выделяются многокомпонентные композиты с иерархически организованными наноструктурами, обеспечивающими улучшенные эксплуатационные свойства.

Современное развитие нанотехнологий неразрывно связано с необходимостью строгой систематизации и классификации наноматериалов. Такой подход позволяет не только упростить поиск и разработку новых функциональных материалов, но и глубже понять взаимосвязи между химическим составом, структурой и целевыми свойствами наносистем. Основой классификации выступает природа нанofаз и их химическая природа: органическая, неорганическая, гибридная. Научная точность в определении принадлежности материала к той или иной группе позволяет прогнозировать его поведение в различных средах, адаптировать под конкретные задачи и применять в сложных многоуровневых технологиях.

Фундаментальное значение имеет анализ связей между структурными параметрами наноматериалов (размер, морфология, кристалличность, дефекты) и их функциональными характеристиками – от электропроводности и каталитической активности до биосовместимости и селективности взаимодействий. Это особенно важно в условиях, когда свойства вещества в наноразмерном диапазоне кардинально отличаются от его объемного аналога.

Основные типы наноматериалов:

– углеродные наноматериалы – одни из наиболее исследованных и широко применяемых классов, включающих фуллерены (C_{60} , C_{70} и др.), графен, углеродные нанотрубки (УНТ) и наноленты. Благодаря уникальной sp^2 -гибридизации атомов углерода эти структуры сочетают в себе малую массу, высокую прочность, гибкость и проводимость. Углеродные нанотрубки (одно-

и многостенные), в частности, являются квинтэссенцией высокофункционального материала: прочность на разрыв превышает таковую у стали в десятки раз при гораздо меньшей плотности; электронная структура зависит от хиральности и диаметра, что позволяет использовать УНТ как проводники или полупроводники. Текущие свойства нашли широкое применение в нанoeлектронике, сенсорике, энергетике (например, как электродные материалы в литий-ионных аккумуляторах), медицине (включая адресную доставку лекарств и биоимиджинг), а также в производстве высокопрочных нанокомпозитов и экранирующих покрытий. Графен, состоящий из одного слоя атомов углерода, демонстрирует рекордную теплопроводность и подвижность носителей заряда, что делает его перспективным материалом для быстродействующих транзисторов и сенсоров. Фуллерены проявляют интересные квантовые свойства и фотоактивность, активно исследуются в области солнечной энергетики и фотодинамической терапии;

– полимерные наноматериалы. К этой категории относят как органические наноструктуры (например, дендримеры, полимерные наночастицы), так и гибридные нанокомпозиты, где полимерная матрица модифицирована неорганическими нанофазами. Полимерные наносистемы отличаются возможностью точного молекулярного дизайна, что позволяет задавать определённые функции – от транспорта лекарственных средств до фотонного отклика. Дендримеры обладают строго ветвящейся симметричной архитектурой, что позволяет использовать их как наноносители для терапии или контрастирования. Гибридные нанокомпозиты, включающие, например, наноглины или наночастицы металлов, успешно применяются в упаковочных материалах, оптоэлектронике, антимикробных покрытиях и функциональных плёнках;

– металлические наноматериалы. Данная группа охватывает наночастицы, нанопорошки, нанокристаллы, наноплёнки и сплавы. Металлы в наноразмере демонстрируют совершенно иные оптические, каталитические и магнитные свойства по сравнению с макроаналогами. Например, золотые и серебряные наночастицы обладают выраженными плазмонными резонансами, что

делает их эффективными в биосенсорике и терапии. Каталитическая активность таких материалов возрастает многократно за счёт высокого отношения поверхности к объёму. Именно поэтому металлические наноматериалы незаменимы в гетерогенном катализе, микроэлектронике, наномagnetизме, а также в медицинских покрытиях с антимикробным действием;

– керамические наноматериалы. Керамика в наноформе – это в первую очередь оксиды (TiO_2 , Al_2O_3 , ZnO), карбиды и нитриды. Основные преимущества – высокая термостойкость, химическая инертность, механическая прочность. При этом нанокерамика может обладать и специфическими функциями: фотокаталитической активностью (как в случае TiO_2), люминесценцией, пьезоэлектрическими свойствами. Применение включает износостойкие и тепловые барьерные покрытия, мембраны и фильтры, биосовместимые имплантаты. Благодаря своей стабильности они часто используются в агрессивных условиях – от двигательных установок до биосред;

– силикатные и глинистые наноструктуры. Материалы базируются на слоистых силикатах (например, монтмориллонит, каолинит) и модифицированных дисперсиях. За счёт своей наноламеллярной структуры и высокой удельной поверхности они обладают отличными барьерными и сорбционными свойствами. Встраивание силикатных нанопластин в полимерные матрицы позволяет получать механически прочные и влагостойкие упаковки, огнеупорные ЛКМ, композиты для строительных материалов с улучшенными характеристиками;

– биогенные наноматериалы. Происходящие из природных источников, биогенные наноматериалы представляют собой экологически безопасные и биоразлагаемые системы. Среди них – наноцеллюлоза, нанохитин, а также наночастицы металлов, синтезированные микроорганизмами или растительными экстрактами. Они находят применение в биомедицине, экоупаковке, тканевой инженерии, доставке лекарств. Например, наноцеллюлоза может использоваться как армирующий компонент в композитах, а наночастицы серебра – как антисептический агент с минимальным экологическим следом.

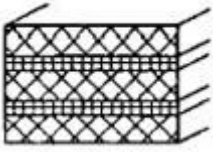
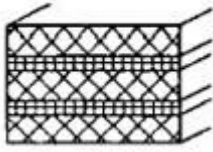
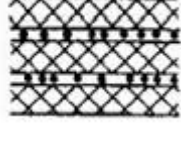
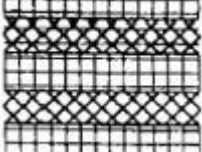
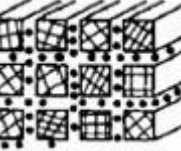
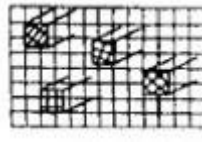
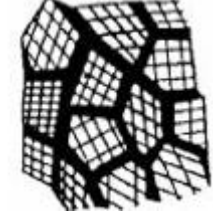
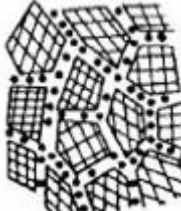
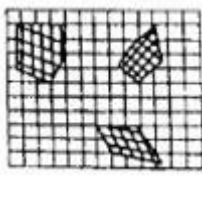
Современные исследования показывают ограниченность объединения всех металлосодержащих наноструктур в единую группу. Чистые металлические наночастицы, металлоидные соединения и наноразмерные оксиды/сплавы демонстрируют принципиально разные физико-химические свойства, что требует их отдельного рассмотрения

Дифференцированный подход обусловлен существенными различиями в электронной структуре, реакционной способности и функциональных характеристиках этих материалов. Особенно важно это разграничение при изучении их каталитической активности, оптических свойств и биосовместимости. На основании этого принято классифицировать структуры наноматериалов согласно данным показателям (таблица 2).

Современные подходы к систематизации наноматериалов учитывают прежде всего геометрические особенности их структурных элементов. В зависимости от пространственной организации кристаллитов различают слоистые, волокнистые и изометричные формы. Критерием отнесения к наноматериалам служит наличие хотя бы одного пространственного параметра (толщины слоя, диаметра волокна или размера зерна), не превышающего 100 нм.

Таблица 2 – Основные типы структуры наноматериалов

Характер распределения	Кристаллитное			Матричное
1	2			3
Химический состав	Состав кристаллитов и границ одинаковый	Состав кристаллитов различен при одинаковом составе границ	Состав кристаллитов и границ разный	Кристаллиты распределены в матрице другого состава

Форма кристаллитов				
Слоистая				
Волокни- стая				
Равноосная				

Наноматериалы можно классифицировать по химическому составу их компонентов и границ раздела. К первой группе относят однофазные материалы, где кристаллиты и границы между ними имеют одинаковый состав. Примеры – нанокристаллические металлы и полимеры с равномерной структурой. Во вторую входят материалы с разным составом кристаллитов, но с химически однородными границами. Третья категория включает вещества, у которых различаются как сами кристаллиты, так и границы между ними. Четвёртая группа объединяет композиты, в которых наночастицы, волокна или слои встроены в матрицу и отличаются от неё по химическому составу. К таким материалам, например, относятся дисперсно-упрочнённые системы.

Наноматериалы, используемые в различных отраслях, должны соответствовать специфическим требованиям, обусловленным назначением. Так, для радиоэлектроники ключевыми параметрами становятся физические характеристики, обеспечивающие надёжность и возможность миниатюризации устройств. В свою очередь, наноматериалы конструкционного назначения применяются преимущественно при создании крупногабаритных изделий и оцениваются, прежде всего, по уровню механической прочности и долговечности.

Современные исследования уделяют особое внимание углеродным нанотрубкам, которые выделяются среди прочих наноматериалов исключительной механической прочностью и упругостью. Характеристики обусловлены особенностями электронного строения углерода – элемента IV группы периодической системы с атомным номером 6.

Ключевой особенностью углерода является способность его атомов формировать различные типы химических связей благодаря явлению гибридизации электронных орбиталей. В зависимости от условий образования соединений реализуются три основных типа гибридизации:

Тетраэдрическая sp^3 -конфигурация возникает при смешении одной s - и трёх p -орбиталей, что приводит к образованию четырёх равноценных ковалентных связей. Такое строение характерно для алмаза, где каждый атом углерода связан с четырьмя соседями, образуя трёхмерный кристаллический каркас.

Плоская sp^2 -структура формируется при гибридизации одной s - и двух p -орбиталей, создавая тригональное расположение связей в одной плоскости. Не участвующая в гибридизации p -орбиталь обеспечивает образование π -связей, что принципиально важно для слоистых структур графита и ароматических соединений.

Линейная sp -гибридизация, возникающая при комбинации одной s - и одной p -орбитали, приводит к образованию цепочечных структур с чередующимися σ - и π -связями. Данный тип связи наблюдается в редких аллотропных модификациях углерода, таких как карбин. Именно способность углерода к различным типам гибридизации объясняет исключительное структурное разнообразие его соединений – от объёмных алмазных кристаллов до плоских графеновых слоёв и цилиндрических нанотрубок. Углеродные нанотрубки, сочетающие sp^2 -гибридизацию с уникальной пространственной организацией, демонстрируют оптимальное сочетание механической прочности и функциональных свойств, что делает их перспективными для создания материалов нового поколения.

Современное представление об аллотропных формах углерода претерпело значительные изменения благодаря ряду ключевых открытий в конце XX века, в частности – синтезу фуллеренов в 1985 году и обнаружению углеродных нанотрубок в 1991 году. Эти открытия положили начало стремительному развитию нанотехнологий и стали отправной точкой для широкомасштабных теоретических и экспериментальных исследований в области углеродных наноструктур. Фуллерены, впервые синтезированные группой учёных под руководством Х. Крото и Р. Смолли, представляют собой замкнутые каркасные углеродные кластеры, в состав которых входят десятки или сотни атомов углерода (C_n), упорядоченно расположенных в форме многогранников, напоминающих геодезические купола. Сферические структуры продемонстрировали ранее неизвестные свойства и стали примером принципиально новой аллотропной формы углерода, отличной как от графита, так и от алмаза.

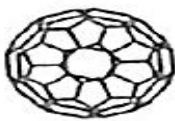
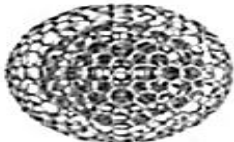
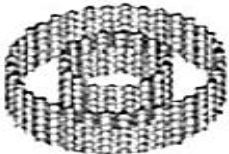
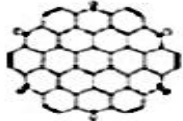
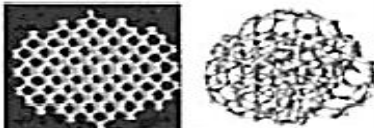
Уникальность нанотрубок обусловлена не только их архитектурой, но и выдающимися физико-химическими свойствами. При диаметре, измеряемом в нанометрах, их длина может достигать нескольких микрометров и более, что создаёт аномально высокое соотношение длины к толщине. Такая геометрия придаёт им исключительно высокую прочность на разрыв, делает их выдающимися теплопроводниками и проводниками, а также обеспечивает устойчивость к химическим воздействиям и радиации.

Структурно углеродные нанотрубки могут быть однослойными (одностенными, или SWNT – Single-Walled Nanotubes) и многослойными (многостенными, или MWNT – Multi-Walled Nanotubes), в зависимости от числа свернутых графеновых слоёв. Их стенки формируются из шестиугольных углеродных колец (C_6), а концы могут быть замкнуты полусферическими фуллереноподобными фрагментами, что придаёт им дополнительную устойчивость.

Активное исследование нанотрубок и фуллеренов стимулировало разработку новых методов синтеза, моделирования и функционализации углеродных наноструктур. Постоянно расширяющееся семейство углеродных нано-

форм – от графена до углеродных нанолент и сфероидальных частиц – продолжает привлекать внимание учёных, инженеров и разработчиков передовых технологий. Основные свойства и параметры наиболее известных представителей этой группы материалов представлены в таблице 2, где обобщены их структурные особенности, размерные характеристики и область потенциального применения.

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 ($\sim C_{60}$)
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

Углеродные нанотрубки существуют в двух основных формах: однослойные (состоящие из единственного графенового слоя) и многослойные (образованные несколькими коаксиально вложенными цилиндрами). В обоих случаях стенки трубок формируются гексагональной решеткой, идентичной

структуре графена, где каждый атом углерода связан с тремя соседями, образуя характерную сетку из шестиугольников (Рисунок 1-2).

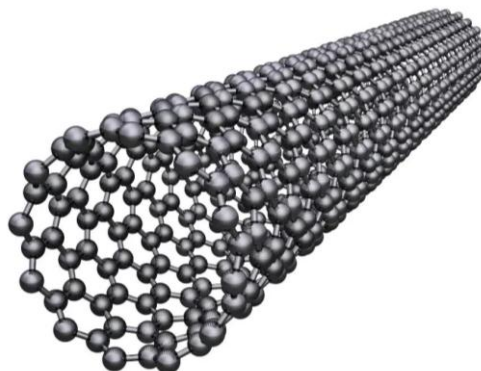
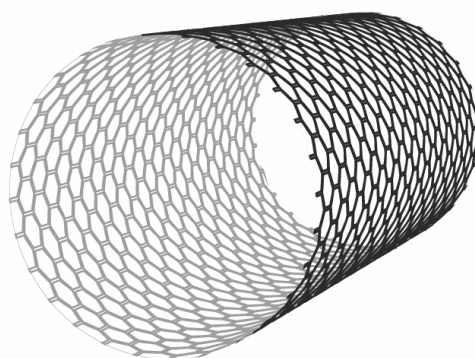


Рисунок 1 – Идеальная целая трубка

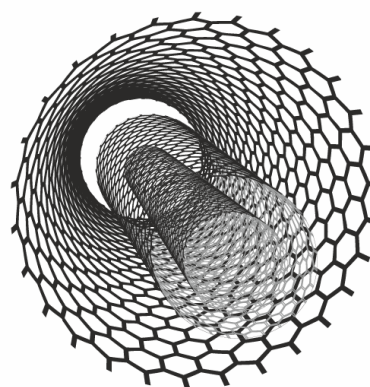
Между соседними слоями в многослойных нанотрубках сохраняется расстояние около 0.34 нм, что соответствует межплоскостному промежутку в кристаллической решетке графита. Замыкание трубки на концах обеспечивается полусферическими «крышками», структура которых сочетает шести- и пятиугольные фрагменты, аналогичные тем, что наблюдаются в молекулах фуллеренов. Такая архитектура придает нанотрубкам замкнутую форму и особую механическую устойчивость.

Одностенная



0,5 - 2,5 нм

Многостенная



7 - 100 нм

Рисунок 2 – Фрагменты одностенной и многостенной нанотрубок

Углеродные нанотрубки (УНТ) – это уникальные наноматериалы, чьи свойства зависят от структуры: способа сворачивания графенового слоя и числа слоёв. Геометрия укладки атомов определяет различные модификации,

включая симметричные и спиральные формы. Изменяя угол закручивания решётки, можно управлять их электронными характеристиками – от проводников до полупроводников.

Благодаря высокой чувствительности к внешним воздействиям УНТ широко применяются в сенсорных системах. Например (рисунок 3), газовые сенсоры на основе УНТ способны обнаруживать даже следовые количества аммиака, водорода и летучих органических соединений, что важно для мониторинга окружающей среды и диагностики заболеваний по выдыхаемому воздуху.

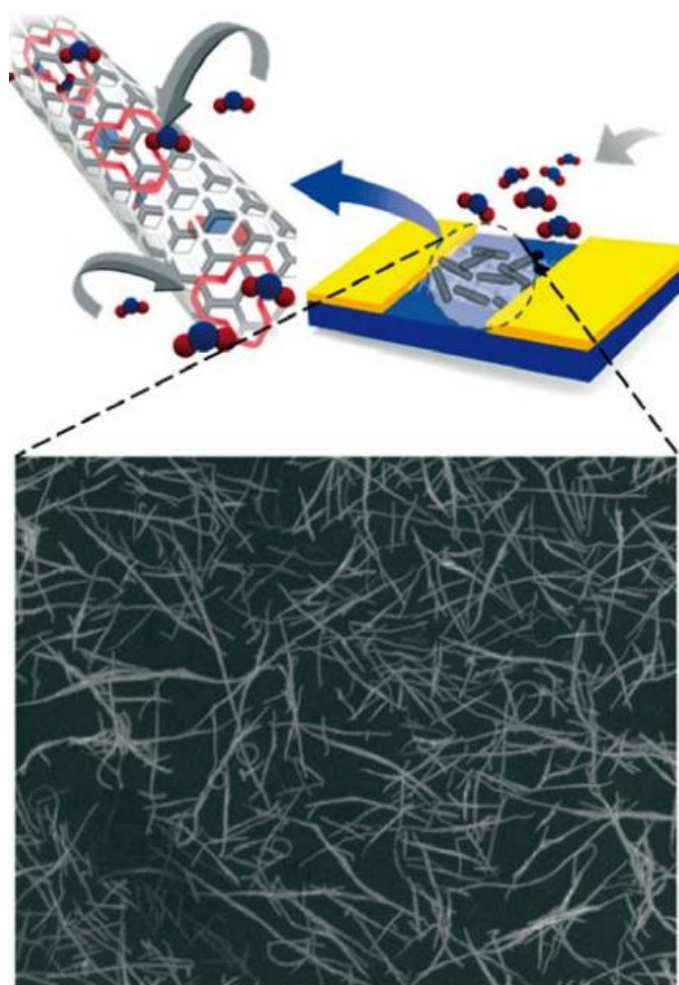


Рисунок 3 – Модель сенсора на основе ОУНТ (одностенная углеродная нанотрубка)

Однако УНТ склонны к агрегации и плохо растворимы, что требует функционализации поверхности – с помощью физических и химических методов – для повышения совместимости с другими материалами и средами.

На практике УНТ применяются в создании прочных композитов, элементах наноэлектроники, системах молекулярного разделения и целевой доставки лекарств (targeted drug delivery). По мере развития технологий ожидается рост числа инновационных решений на их основе – в энергетике, медицине и ИТ.

1.2 Структура углеродных нанотрубок

Среди множества наноструктур сегодня наибольшее внимание привлекают углеродные нанотрубки благодаря их выдающимся упругим и прочностным характеристикам. Важнейшим фактором при образовании таких нанотрубок является ориентация исходной графитовой плоскости относительно оси будущей трубки. Кроме того, значимым параметром классификации выступает количество слоев и их взаимное расположение.

Углеродные нанотрубки классифицируют по хиральности - способности совпадать со своим зеркальным отражением. Симметричные («кресло» при $n=m$ и «зигзаг» при $m=0$) и асимметричные (хиральные) формы различаются электронными свойствами. Эти особенности определяются углом сворачивания графенового слоя и влияют на проводимость материала.

Хиральность описывается набором индексов (m, n), которые указывают на смещение шестиугольника графеновой решётки при сворачивании плоскости в трубку. Дополнительно используется угол α – между направлением сворачивания и ориентиром соседних шестиугольников, но для полного описания формы нанотрубки также необходим её диаметр. Значения индексов (m, n) однозначно определяют диаметр однослойной нанотрубки.

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:

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

При сворачивании графенового слоя в нанотрубку особый интерес представляют два ключевых направления. Когда угол сворачивания составляет 0° , образуется так называемая «кресловидная» (armchair) структура с индексами (m, m). При угле 30° возникает «зигзагообразная» (zigzag) конфигурация, описываемая индексами ($m, 0$). Эти специфические геометрические параметры обеспечивают идеальное совпадение краёв графенового фрагмента без искажений его кристаллической решётки.

Такие симметричные конфигурации принципиально важны, так как они определяют фундаментальные электронные свойства нанотрубок. В частности, armchair-структуры всегда проявляют металлический тип проводимости, в то время как zigzag-конфигурации могут быть как металлическими, так и полупроводниковыми в зависимости от конкретных значений хиральных индексов. Это различие обусловлено особенностями зонной структуры, которая формируется при сворачивании двумерного графена в одномерную нанотрубку.

Ранее уже упоминалось, что нанотрубки с индексами ($n, 0$) принято называть зигзагообразными или zigzag-нанотрубками (см. рисунок 4а), тогда как структуры с равными индексами (n, n) относятся к категории «креслообразных» или armchair-нанотрубок (рисунок 4б). На изображениях элементарные ячейки этих структур обычно выделяются чёрным цветом для наглядности.

Таким образом, форма и ориентация углеродных связей в нанотрубках зависят от их хиральных параметров, что определяет их физико-химические характеристики и возможности применения.

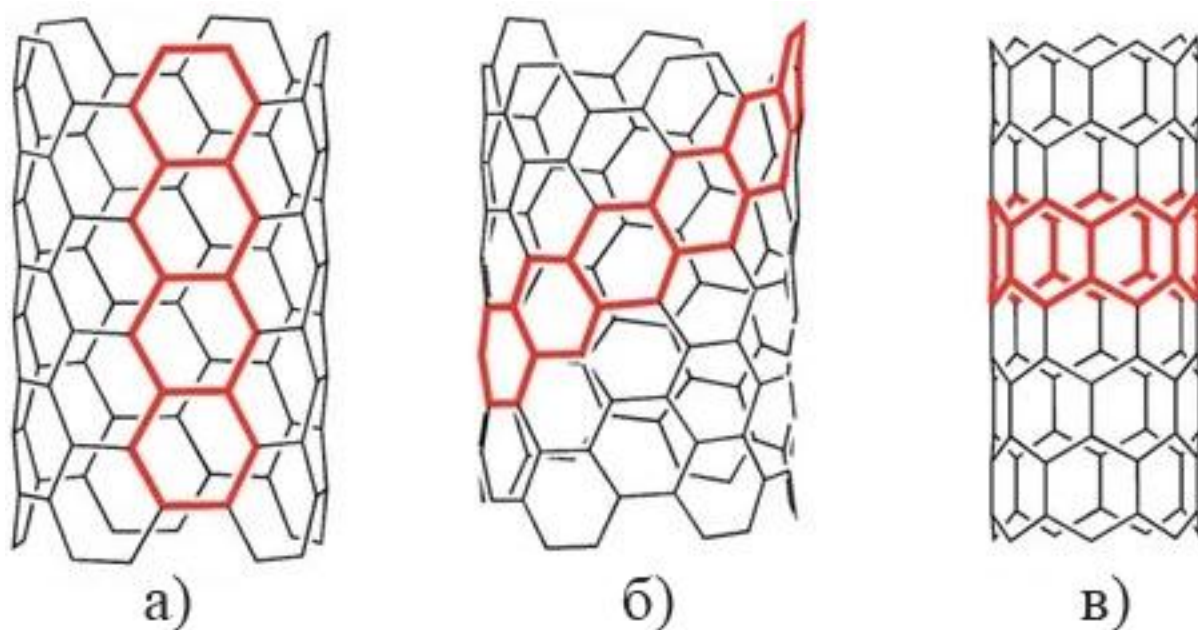


Рисунок 4 – Строение ахиральных углеродных нанотрубок

а) типа «кресло», б) типа «спираль», в) типа «зигзаг»

Физические и электронные свойства углеродных нанотрубок во многом определяются их геометрией, которая, в свою очередь, зависит от способа сворачивания графеновой плоскости. Одним из ключевых факторов, определяющих тип получаемой нанотрубки, является ориентация замыкания листа графена в цилиндрическую форму – именно этот процесс диктует структуру и симметрию образующейся наноструктуры.

Сворачивание графенового слоя описывается с использованием пары целых чисел (n, m) , которые задают так называемый вектор сворачивания. Этот вектор соединяет две эквивалентные атомные позиции в кристаллической решётке графена и определяет направление, по которому плоскость замыкается в цилиндр. От этих параметров напрямую зависят такие важные характеристики, как диаметр нанотрубки и её хиральный угол – величина, оказывающая фундаментальное влияние на электронную структуру материала и, соответственно, на его проводящие свойства.

В зависимости от конкретных значений пары (n, m) нанотрубки классифицируются на три основные типа, каждый из которых обладает своей уни-

кальной симметрией и набором свойств. Если $m = 0$, то получаем так называемую «зигзагообразную» (zigzag) нанотрубку. При равенстве параметров, то есть $n = m$, формируется «плечевая» (armchair) конфигурация. Все остальные комбинации соответствуют хиральным нанотрубкам, обладающим асимметричной спиральной структурой. Различия представлены на рисунке 5.

Особый интерес представляют armchair-нанотрубки, так как они демонстрируют металлический характер проводимости, тогда как zigzag и хиральные трубки могут вести себя как полупроводники или металлы в зависимости от конкретных параметров (n, m) . Таким образом, направление сворачивания графена и выбор параметров (n, m) играют решающую роль в проектировании нанотрубок с заданными свойствами.

Сегодня способность контролировать хиральность и диаметр нанотрубок является одним из важнейших направлений исследований в области наноматериалов. Разработка методов селективного синтеза позволяет создавать нанотрубки с predetermined электронной природой, что открывает путь к их целенаправленному применению в микроэлектронике, нанофотонике, сенсорах и других высокотехнологичных областях.

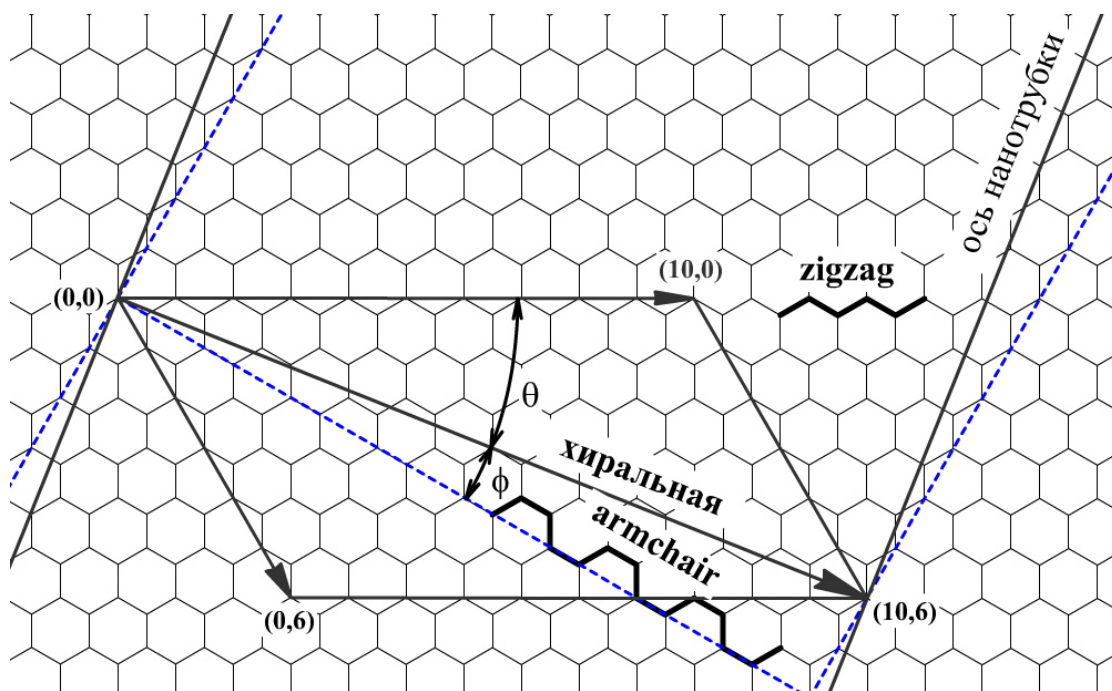


Рисунок 5 – Схематическое изображение атомной структуры графеновой плоскости. Способы образования однослойной нанотрубки

При зеркальном отражении нанотрубка с хиральными индексами (n, m) превращается в (m, n) , что подчёркивает их хиральную природу – большинство конфигураций не совпадают со своим зеркальным аналогом. Однако симметричные структуры, такие как «кресло» (armchair, $n = m$) или «зигзаг» (zigzag, $m = 0$), либо остаются неизменными, либо совмещаются с исходной формой при повороте.

Структура нанотрубки однозначно задаётся вектором сворачивания $C = n \cdot a_1 + m \cdot a_2$, где a_1 и a_2 – базисные векторы графеновой решётки. Вектор на изображении соединяет два идентичных атома, которые совпадут после сворачивания графенового листа в цилиндрическую форму. Для исключения повторов и дублирующих структур вводится условие $n \leq m$, при котором каждая пара чисел (n, m) задаёт уникальную конфигурацию нанотрубки. Именно эта конфигурация напрямую влияет на её электронные характеристики (рисунок 6).

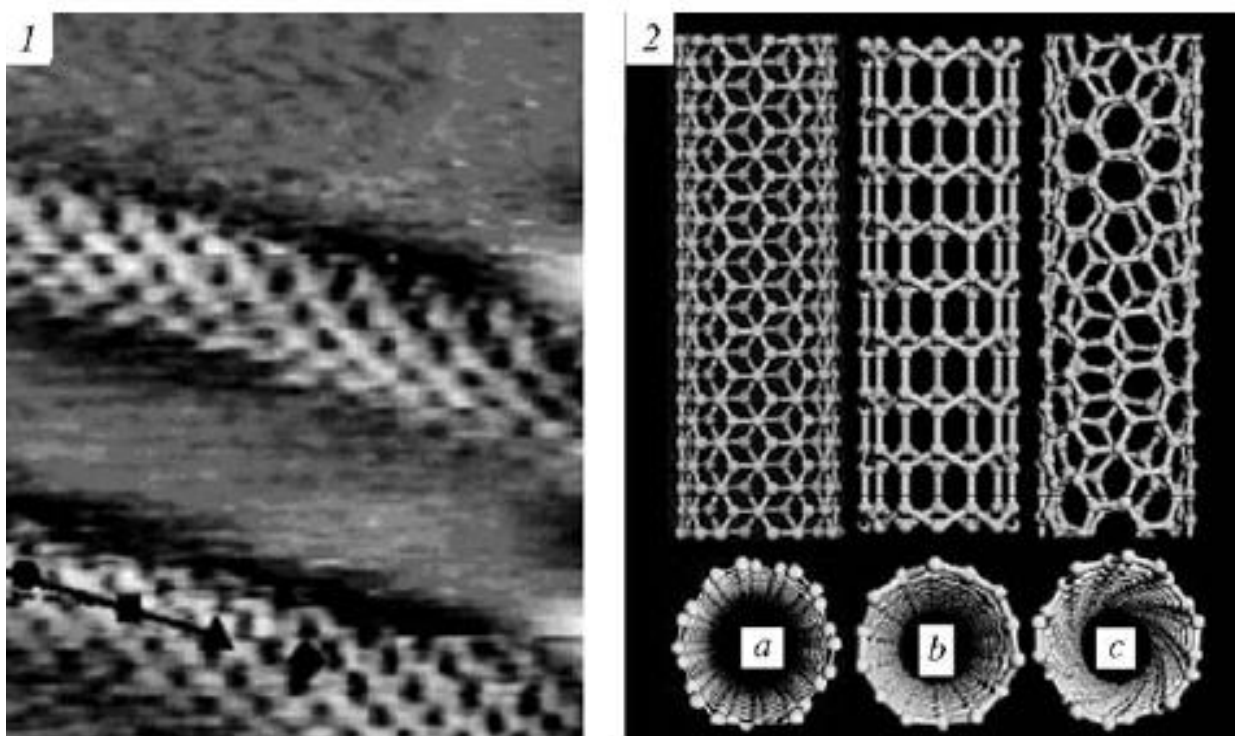


Рисунок 6 – СТМ изображение атомной структуры углеродных нанотрубок (1) и атомные модели основных конфигураций трубок (2): a – armchair, b – zigzag, c – хиральные НТ

Электронные свойства углеродных нанотрубок (УНТ) представляют собой одно из наиболее интересных направлений современной нанофизики, поскольку они существенно зависят от хиральности и геометрической конфигурации трубки. Именно топологическая структура углеродной решётки определяет поведение электронов в нанотрубке, делая её либо металлической, либо полупроводниковой.

Углеродные нанотрубки классифицируются с помощью пары целых чисел (n, m) , которые описывают способ сворачивания графенового листа в цилиндр. Эта хиральность напрямую влияет на электронные свойства УНТ. Если разность $n - m$ делится на 3, нанотрубка ведёт себя как металл, в противном случае она проявляет свойства полупроводника. Таким образом, топология решётки определяет характер зонной структуры материала.

Металлические УНТ характеризуются отсутствием запрещённой зоны в электронной структуре. Благодаря этому они демонстрируют высокую электропроводность, особенно при низких температурах, когда рассеивающие процессы минимальны. Эти свойства делают их перспективными для применения в низкотемпературной электронике и в разработке квантовых устройств, где важна минимизация потерь энергии и высокая подвижность носителей.

В отличие от металлических, полупроводниковые УНТ имеют энергетический зазор, величина которого определяется диаметром и хиральностью нанотрубки. При уменьшении диаметра ширина запрещённой зоны увеличивается, что даёт возможность тонкой настройки свойств материала под конкретные задачи. Однако при низких температурах носители замерзают, что ограничивает использование таких нанотрубок в криогенных условиях. С другой стороны, эти свойства оказываются полезными в качестве активных элементов в полевых транзисторах и других полупроводниковых приборах.

Реальные структуры: от однослойных к многослойным УНТ. На практике чаще всего встречаются не одиночные нанотрубки, а их многослойные формы, называемые многослойными углеродными нанотрубками (МСУНТ). Такие структуры представляют собой коаксиальные трубки — своеобразные

«матрёшки», где каждая последующая трубка вложена в предыдущую, образуя концентрические слои (см. рисунок 6а).

МСУНТ состоят из нескольких графеновых слоёв, свернутых по отдельным хиральным векторам. Это приводит к значительной морфологической и структурной изменчивости: слои могут иметь различные хиральности и диаметры, а межслойные взаимодействия играют важную роль в формировании электронной структуры всей системы. Особенно интересны изменения поперечных сечений: от почти идеальных цилиндров до эллиптических или сплюснутых форм, что отражается на проводимости и механических свойствах. Примеры таких поперечных конфигураций представлены на рисунке 7.

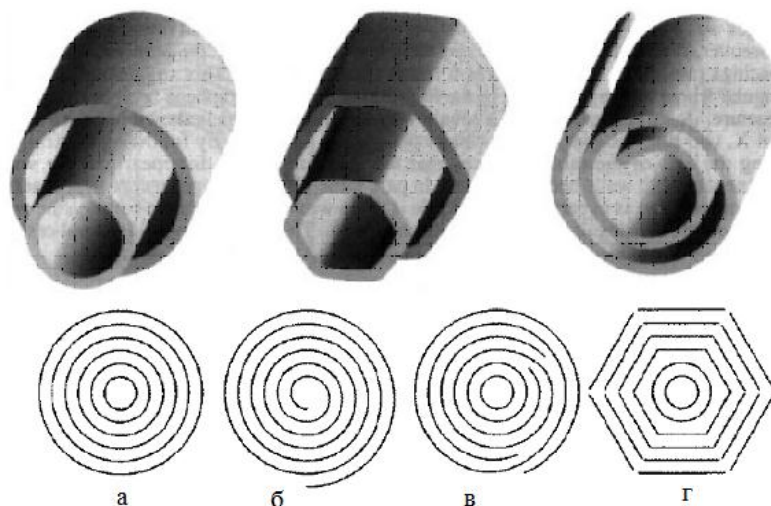


Рисунок 7 – Схематичное изображение наиболее распространенных структур многослойных нанотрубок

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

Как показано на рисунке, «матрёшечные» МСУНТ (рис. 7а) состоят из плотно вложенных графеновых цилиндров, полностью изолирующих внутреннюю полость от внешней среды. Это исключает проникновение молекул внутрь и ограничивает применение таких структур как сорбентов или носителей веществ. Во втором варианте (рис. 7б), цилиндр образуется из свернутой графеновой плоскости. Несмотря на иное строение, он также остаётся герметичным и непроницаемым для внешних молекул, что снижает его функциональность в задачах транспорта и адсорбции. Наибольший интерес вызывает

третий тип (рис. 7в) – структура из фрагментов графита, самособранных в цилиндр с системой пор. Такие нанотрубки проницаемы для молекул, обладают высокой сорбционной способностью и подходят для газового хранения, катализа и целевой доставки веществ.

Во всех типах МСУНТ расстояние между слоями остаётся около 0,34 нм – как в графите. Это обеспечивается ван-дер-ваальсовыми силами, удерживающими графеновые оболочки в цилиндрической форме. Обычно МСУНТ состоят из нескольких до нескольких десятков слоёв, повторяющих форму внутреннего. Минимальный диаметр таких трубок – около 0,7 нм, что связано с пределами допустимой кривизны. Размер внешних слоёв зависит от числа оборотов и радиуса начальной трубки при неизменном межслоевом интервале.

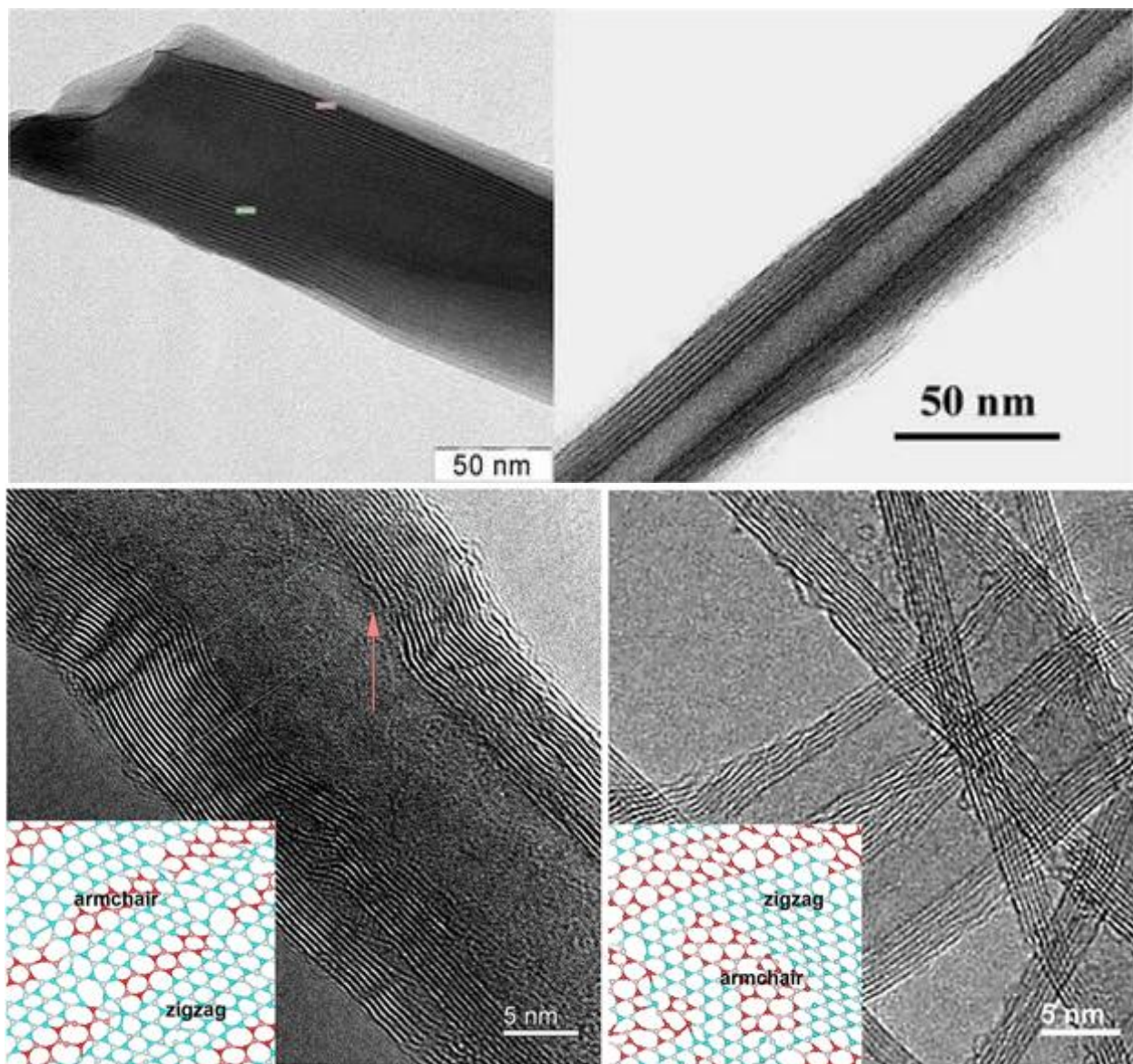


Рисунок 8 – Фрагменты многослойных нанотрубок

Углеродные нанотрубки в материале могут существовать не только в виде одиночных, изолированных структур, но и образовывать более сложные иерархические системы – так называемые пучки или снопы, представляющие собой агрегаты из сотен, а порой и тысяч параллельно ориентированных трубок. Формирование таких структур обусловлено слабым, но все же существенным межтрубочным взаимодействием, главным образом за счёт ван-дер-ваальсовых сил.

Несмотря на свою сравнительно низкую энергию по сравнению с ковалентными или ионными связями, ван-дер-ваальсовы силы играют важную структурообразующую роль, обеспечивая стабильность пучков без необходимости внешнего сшивания или связующих агентов. Эти взаимодействия позволяют трубкам находиться в тесном контакте, но при этом сохранять определённую свободу движения относительно друг друга, что придаёт агрегатам уникальную гибкость и механическую адаптивность.

Интересно отметить, что такая слабая сцепленность между отдельными нанотрубками может проявляться на макроскопическом уровне, влияя на свойства всего материала – в частности, на его механическую прочность, теплопроводность, электропроводность, а также на способность к деформации и самовосстановлению. Например, в волокнах, нитях или пленках, изготовленных на основе нанотрубок, межтрубочные взаимодействия регулируют поведение материала при растяжении и сжатии. Кроме того, наличие пучковой структуры оказывает влияние на процессы теплопереноса и электронного транспорта, поскольку электрон может перемещаться не только вдоль оси отдельной трубки, но и между трубками через туннелирование, особенно при их тесном сближении.

2 МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ АХИРАЛЬНЫХ НАНОТРУБОК

2.1 Построение математических моделей атомной структуры наноматериалов

Математическое моделирование атомного каркаса наноматериалов представляет собой важнейший инструмент для изучения их фундаментальных свойств, прогнозирования поведения при внешних воздействиях и оптимизации структурных параметров для целевых приложений. Особенно это актуально для углеродных нанотрубок (УНТ), чья структура, механика и электронные свойства чувствительны к мельчайшим изменениям в атомной конфигурации.

На уровне атомного каркаса наноматериалов моделирование позволяет учитывать межатомные связи, топологические параметры, хиральность и дефекты кристаллической решётки. Основной задачей здесь является построение достоверной атомной модели, отражающей реальную геометрию и симметрию наносистемы, с последующим применением численных методов для анализа её свойств.

Работы по численному моделированию поведения атомно-молекулярных систем ведутся с середины XX века и к настоящему времени достигли значительных масштабов. Постоянное совершенствование вычислительной техники и программного обеспечения делает компьютерное моделирование всё более сверхважным инструментом в исследовании и создании наноструктур.

Атомно-молекулярные системы, в отличие от макроскопических объектов, требуют дискретного подхода к описанию: на наноуровне вещество рассматривается как совокупность отдельных атомов, молекул или более сложных наноструктур. Исследования таких систем подразумевают не только разработку специализированных математических моделей, но и формирование методов точной пространственной визуализации. Практическая ценность по-

добных работ уже подтверждена внедрением результатов в прикладные технологии.

Выделяют три основные направления, в рамках которых вычислительная нанотехнология демонстрирует наибольшую актуальность:

- проектирование материалов с рекордным сочетанием прочности и малого удельного веса;
- разработка перспективных устройств для обработки и хранения информации на наноуровне;
- создание микророботов, размеры которых сопоставимы с биологической клеткой.

Для описания структуры углеродных нанотрубок применяются индексы хиральности (n, m) , определяющие направление сворачивания двумерного графенового листа в цилиндрическую форму. Эти индексы задают не только диаметр и угловую ориентацию трубки, но и напрямую влияют на её электронную структуру (металлический или полупроводниковый характер), симметрию и механические параметры.

Построение моделей начинается с задания векторов трансляции и хирального вектора $Ch = n \cdot a_1 + m \cdot a_2$, где a_1 и a_2 – базисные векторы графеновой решётки. На основе этих векторов формируется цилиндрическая структура, которая затем замыкается с учётом периодичности по оси нанотрубки.

При визуализации деформационных процессов крупномасштабных наноструктур каждый атом и связь отображаются в виде сфер и соединяющих их линейных или цилиндрических элементов, что обеспечивает наглядное представление пространственной организации системы. Одним из наиболее сложных аспектов является точная постановка геометрии расчетной области и соответствующих ей математических уравнений. В тех случаях, когда габариты активных элементов электронных устройств сопоставимы с молекулярными масштабами, становится необходимым детальное описание конфигурации всех компонентов на атомном уровне. Для этого требуются достоверные

данные о кристаллической структуре наноматериалов, их межатомных взаимодействиях и спектральных характеристиках в равновесных и квазиравновесных состояниях. В практике научных исследований такие сведения нередко оказываются фрагментарными или содержат неточности, что усложняет формирование полной и точной модели исследуемой конфигурации.

Атомистическое моделирование играет ключевую роль в исследовании наноструктурированных материалов, поскольку позволяет учитывать межатомные и электронные взаимодействия с высокой степенью точности. Такой подход особенно важен при создании материалов с заданными свойствами, где необходимо понимать поведение системы на уровне отдельных атомов.

Основу моделирования составляет многоуровневая методология, сочетающая квантово-механические и классические методы. Для расчёта электронной структуры обычно применяются методы квантовой химии, например теория функционала плотности (DFT), в то время как эволюция системы во времени или под внешним воздействием описывается методами молекулярной динамики или Монте-Карло. Такое объединение позволяет проводить моделирование на разных масштабах – от нано- до мезоразмеров.

Прежде чем приступить к основному этапу вычислений, как правило, выполняется предварительный анализ структуры – геометрический и спектральный. На этом этапе определяют начальные параметры, выявляют возможные дефекты и оценивают стабильность конфигурации. В ходе основного моделирования отслеживаются изменения геометрии и спектра, что служит индикатором корректности расчёта и позволяет оперативно вносить коррективы.

Однако одного численного анализа зачастую недостаточно: без наглядного представления данные трудно интерпретировать. Визуализация, включая 2D- и 3D-модели, анимации и интерактивные графики, становится важным инструментом в работе исследователя. Она помогает выявить структурные особенности, аномалии и закономерности, которые могут ускользнуть при чисто числовом анализе.

Важной составляющей моделирования является визуализация, обеспечивающая наглядное представление атомных структур, их динамики и возникающих явлений, таких как дефекты, диффузия, деформация и реакционная активность. Визуализация способствует лучшему пониманию процессов и облегчает сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными, включая рентгеноструктурный анализ, электронную микроскопию и спектроскопию. Это делает её важным инструментом как в фундаментальных исследованиях, так и при разработке наноматериалов и технологий.

Стандартный рабочий цикл многомасштабного моделирования выглядит так:

- подготовка начальной модели. Начальную геометрию наноструктуры берут из баз данных (молекулярных или кристаллических шаблонов) либо конструируют вручную, при необходимости внося правки с помощью специализированных редакторов;

- расчётные этапы. На полученной модели последовательно или параллельно проводят квантово-химические расчёты, молекулярномеханические релаксации, молекулярную динамику и/или Монте-Карло-симуляции для изучения энергетики, структурной стабильности и термодинамики;

- анализ результатов. Обрабатывают и интерпретируют рассчитанные величины (энергетические уровни, межатомные расстояния, частотные спектры и т. д.), сопоставляя их с экспериментальными характеристиками и целевыми свойствами материала.

Существующий набор программ для визуализации молекулярных структур в основном предназначен для работы с относительно небольшими системами (несколько сотен атомов). При этом моделирование наноматериалов, включающих сотни тысяч и более атомов, требует расширенного функционала, особенно по части анализа комплексных пространственных конфигураций и электронных характеристик.

Геометрические визуализаторы, как правило, используют приёмы трёхмерного представления: они строят координатную сетку объекта, отображают

поверхность и среду (освещение, текстуры, цветовые оттенки). В зависимости от задачи применяются растровая либо векторная графика (иногда с элементами фрактальных алгоритмов). Любая такая иллюстрация сводится к набору примитивов (отрезков, дуг, окружностей, эллипсов, сплайнов), что обеспечивает точное и наглядное отображение формы наноструктуры.

В графическом представлении объект задаётся набором точек в заданной системе координат и набором примитивов, связывающих эти точки. Любые двумерные или трёхмерные трансформации (поворот, масштабирование, смещение) выполняются посредством матричных операций. В плоскости для этого используют 3×3 -матрицы однородных координат, а в пространстве – 4×4 -матрицы. Чтобы отобразить трёхмерную модель на экране, применяют проекционные преобразования. При параллельной проекции все проецирующие лучи направлены параллельно заданному вектору, а при центральной (перспективной) – концентрируются в одной точке. Каждому виду проекции соответствует своя матрица проецирования.

Для визуализации поверхностей широко используется метод наложения текстур: на значимые участки модели наносится повторяющийся узор (текстура), позволяющий задавать реалистичные детали без высокого полигонального разрешения. Цветовые схемы в компьютерной графике обычно представлены либо в формате RGB (три канала для экранного отображения), либо CMYK (четыре канала для печати), где каждый канал задаёт интенсивность соответствующего цвета или оттенка.

Моделирование освещения и окружающей среды включает расчёт таких эффектов, как прямой и рассеянный свет, затенение и фоновые отражения. При этом цвет объекта корректируется в зависимости от положения источников света и свойств материалов, чтобы визуально передать объём и рельеф. В более сложных случаях применяется когнитивная графика, где изображение кодируется последовательностью символов: сравнивая такие строковые представления, системы распознают объекты и могут выполнять с ними опреде-

лённые действия (например, автоматическую сегментацию или классификацию).

Углеродные нанотрубки являются одними из наиболее активно исследуемых и визуализируемых объектов в современной нанонауке благодаря своим уникальным структурным и физико-химическим свойствам. Представляя собой цилиндрические молекулы, построенные из свернутых графеновых листов, они обладают диаметром в пределах 0,5-50 нм, а их длина может достигать нескольких микрометров. Такая форма придаёт нанотрубкам высокую механическую прочность, электрическую проводимость и термическую стабильность, что делает их перспективными для широкого спектра применений – от нанoeлектроники и сенсоров до композитных материалов и биомедицины.

Вначале необходимо провести подробный вывод аналитических уравнений, описывающих положение каждого атома в этих трубках, после чего продемонстрируем, как на основе полученных математических моделей можно построить программную систему для наглядной трёхмерной визуализации их структуры, показанной на рисунке 9.

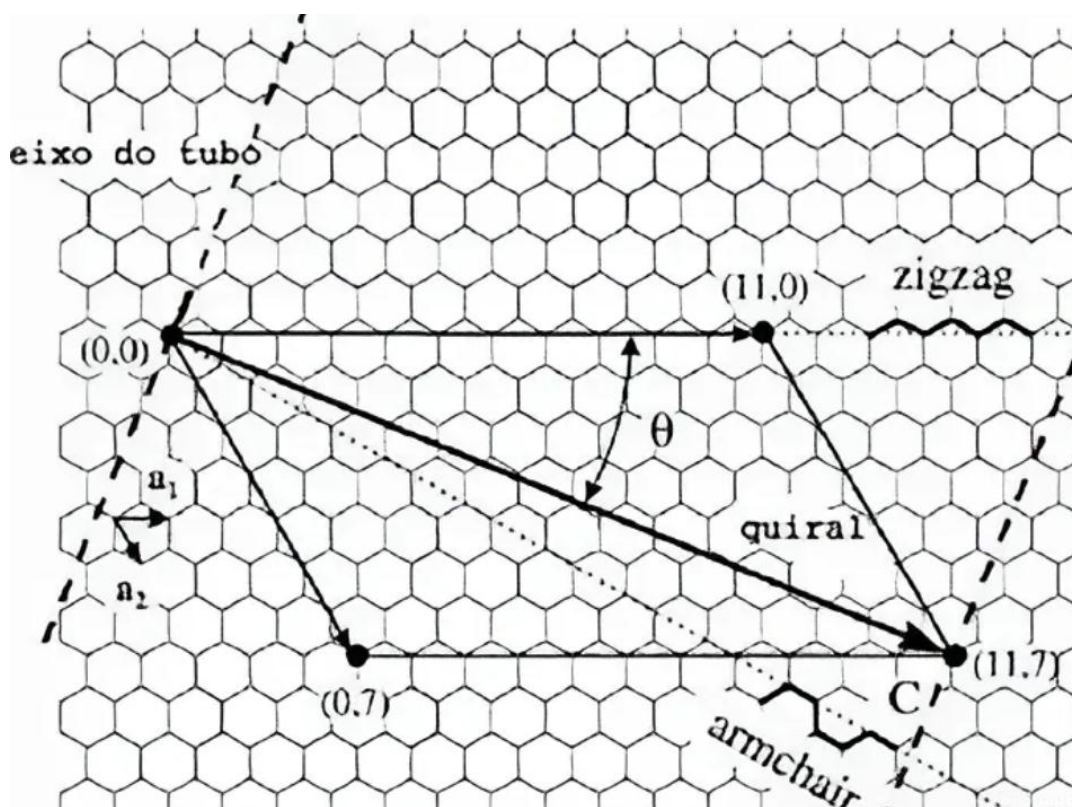


Рисунок 9 – Сворачивание графитового слоя в трубку

Для построения трёхмерной модели углеродной нанотрубки необходимо задать её атомную структуру с учётом пространственного расположения атомов углерода. Такая нанотрубка может быть представлена в виде последовательности идентичных углеродных колец, упорядоченных вдоль оси цилиндра. Каждый атом углерода в этой модели располагается на поверхности воображаемого цилиндра, формируя регулярную решётку, соответствующую исходной структуре графена, свернутого в трубку.

Для точного моделирования нужно задать начальные геометрические параметры, определяющие форму и размеры нанотрубки. К ним относятся:

- величина $d_0 = 0,142$ нм представляет собой минимальное расстояние между ближайшими атомами углерода в плоскости графена. Текущее значение является фундаментальной структурной характеристикой, определяющей не только геометрию самого графена, но и масштаб всех производных наноструктур, таких как углеродные нанотрубки, фуллерены и графеновые ленты;
- n , число атомных ячеек, формирующих одно углеродное кольцо (или один слой нанотрубки). Этот параметр определяет окружность трубки;
- m , количество колец (или слоёв) вдоль оси нанотрубки, задающее её длину.

Указанные параметры позволяют рассчитать геометрические характеристики нанотрубки, в том числе радиус R её цилиндрической оболочки. Радиус определяется исходя из длины окружности, на которой размещаются атомы одного кольца, с учётом расстояния d_0 между соседними атомами.

Для более точного описания формы углеродного кольца в нанотрубке также вводятся внешние и внутренние диаметры: D и d соответственно (рисунок 10). Эти параметры учитывают размеры самих атомов углерода, а не только межатомные расстояния. В данном случае для расчёта используется ковалентный радиус атома углерода $r_{эл} = 0,077$, табличное значение которого составляет:

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

$$d = 2 \cdot (R - r_{\text{эл}}),$$

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

Формулы для вычисления внешнего и внутреннего диаметров кольца с учётом ковалентного радиуса позволяют более точно аппроксимировать реальную структуру нанотрубки в рамках графической модели.

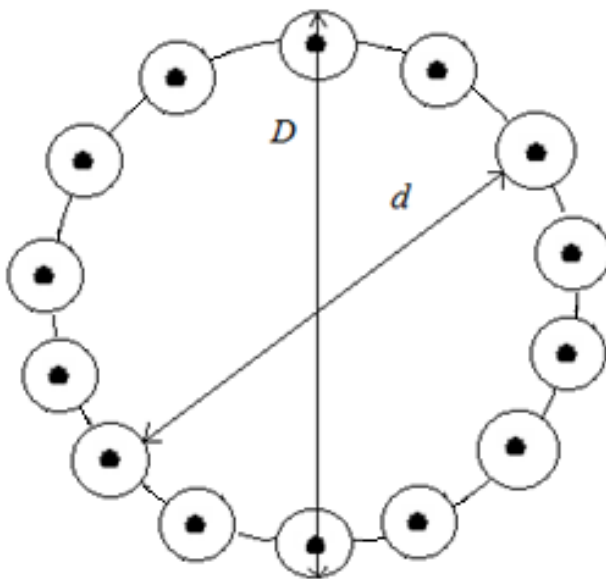


Рисунок 10 – Изображение внутреннего и внешнего диаметров кольца

Кроме того, на основании геометрических схем, можно выполнить точный расчёт массы углеродной нанотрубки. Иллюстрации визуализируют алгоритм формирования структуры нанотрубок в зависимости от выбранной конфигурации – зигзагообразной, креслообразной или иной ахиральной формы.

При моделировании углеродных нанотрубок каждый атом углерода занимает строго определённое положение в пространстве, что обусловлено регулярной кристаллической структурой, унаследованной от графена. Положение атомов в кольцевом сечении и вдоль оси трубки рассчитывается на основе заданных параметров, что позволяет с высокой точностью воспроизвести геометрию структуры и определить общее число атомов в модели.

Основными параметрами, определяющими структуру нанотрубки, являются количество атомов в одном кольце по окружности (обычно обозначается

как n), число таких кольцевых слоёв вдоль продольной оси трубки (m), межслоевой шаг (расстояние между соседними кольцами, определяемое на основе длины связи между атомами углерода), а также тип конфигурации – зигзагообразная, армчаир (armchair) или хиральная. Эти параметры задаются пользователем при генерации модели и непосредственно влияют на диаметр, длину и симметрию нанотрубки, а также на её физические свойства, включая проводимость, прочность и реакционную способность.

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 $1,993 \cdot 10^{-26}$ кг.

В следующем разделе будет проведён подробный анализ математических моделей, применяемых для определения одного из ключевых геометрических параметров углеродных нанотрубок – радиуса цилиндра R . Этот параметр играет центральную роль в описании пространственной конфигурации нанотрубки и влияет на её физические свойства, включая прочностные характеристики, электронную структуру и теплопроводность.

В качестве объектов моделирования выбраны два основных типа ахиральных углеродных нанотрубок: с зигзагообразной конфигурацией (zigzag) и с так называемой креслообразной структурой (armchair). Эти формы представляют собой два предельных случая ориентации векторов свёртки в двумерной гексагональной решётке графена и широко используются в научных и прикладных исследованиях благодаря своей симметрии и предсказуемым свойствам.

Для каждой конфигурации будут рассмотрены соответствующие аналитические выражения, позволяющие рассчитать радиус R с учётом межатомных расстояний, параметров элементарной ячейки и особенностей топологии конкретной структуры. Также будут представлены примеры расчётов и пояснено, как геометрические параметры влияют на итоговые характеристики нанотрубок. Полученные результаты будут положены в основу дальнейшей визуализации и численного анализа исследуемых объектов.

2.2 Модельный подход к описанию нанотрубок типа «зигзаг»

Если сворачивание графеновой решётки происходит вдоль направления, параллельного ребру гексагональной ячейки, в результате формируется нанотрубка типа «armchair», что в переводе означает «кресельная». Такое название связано с особенностями расположения атомов углерода вдоль окружности поперечного сечения трубки: их конфигурация визуально напоминает сиденье с подлокотниками – характерную форму кресла.

При построении данной структуры атомы, а также центры гексагональных ячеек, располагаются на одной окружности, формируя в сечении правильный многоугольник. Это обеспечивает равномерное распределение атомов по периметру трубки, аналогично тому, как это происходит в случае нанотрубок зигзагообразного типа. Однако пространственная симметрия и характер взаимодействия между атомами в конфигурации «armchair» существенно отличаются, что напрямую влияет на электронные свойства и механическую прочность материала.

На рисунке 11 представлена визуализация нанотрубки с кресельной структурой, где отчётливо прослеживается регулярность атомной решётки и периодичность в продольном направлении. Такая организация структуры особенно важна при моделировании и анализе нанотрубок в задачах, связанных с нанoeлектроникой, сенсорикой и разработкой композитных материалов.

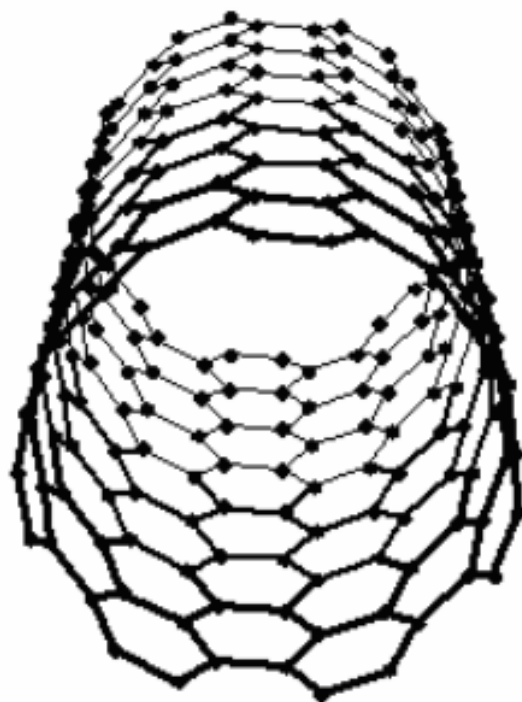


Рисунок 11 – Общий вид нанотрубки со структурой типа «кресло»

Развернутый в пленку атомный каркас углеродной нанотрубки со структурой типа «кресло» представлен на рисунке 12.

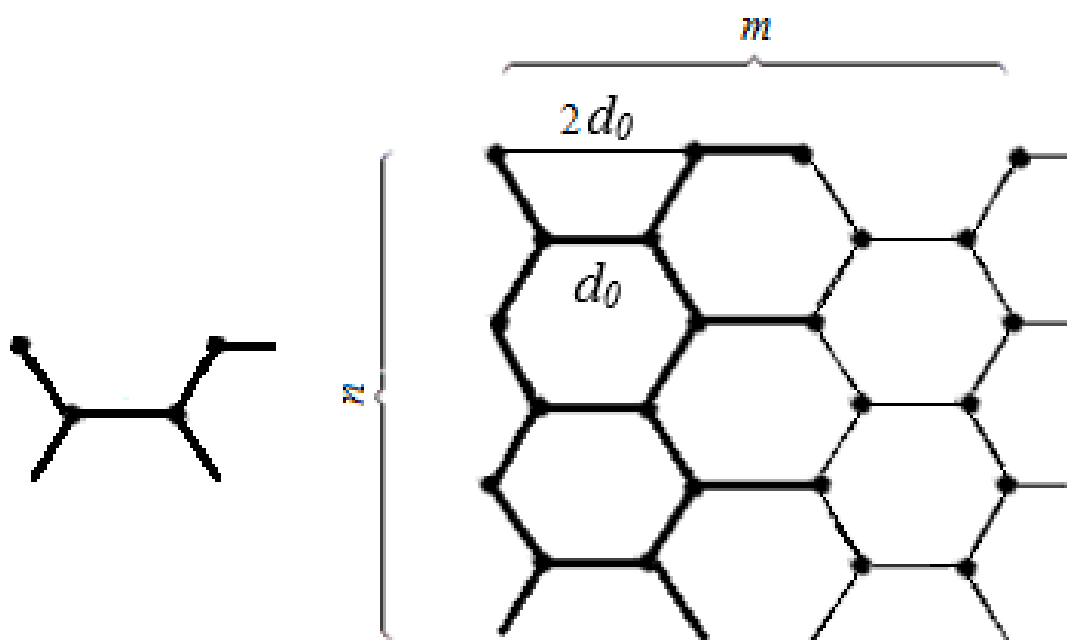


Рисунок 12 – Изображение атомного каркаса углеродной нанотрубки

На рисунке 16 схематически показано геометрическое размещение атомов углерода в сечении нанотрубки. Диаграмма отражает фрагмент кольцевой

структуры углеродной нанотрубки, в котором атомы углерода расположены по дуге окружности с радиусом R , соответствующим радиусу нанотрубки.

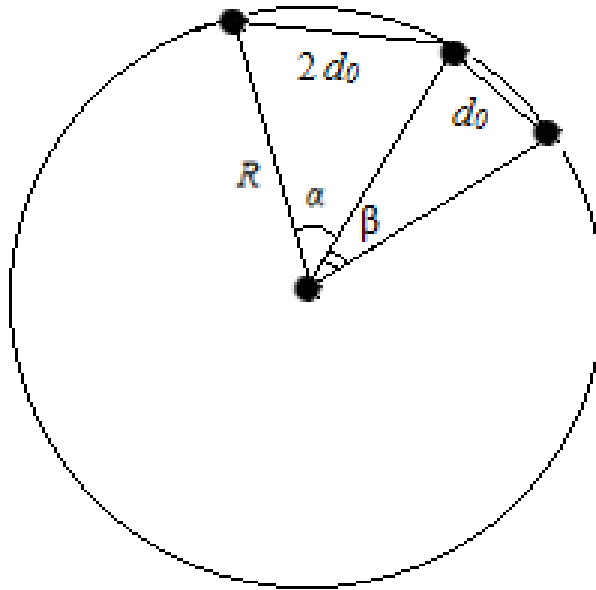


Рисунок 16 – Геометрическая иллюстрация нахождения стороны правильного n -угольника

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$R = \frac{d_0}{\sin \frac{\alpha}{2}} \tag{10}$$

подставим в формулу 10, получим:

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

Используя формулу обратных тригонометрических функций:

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

получим:

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

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:

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

То 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.

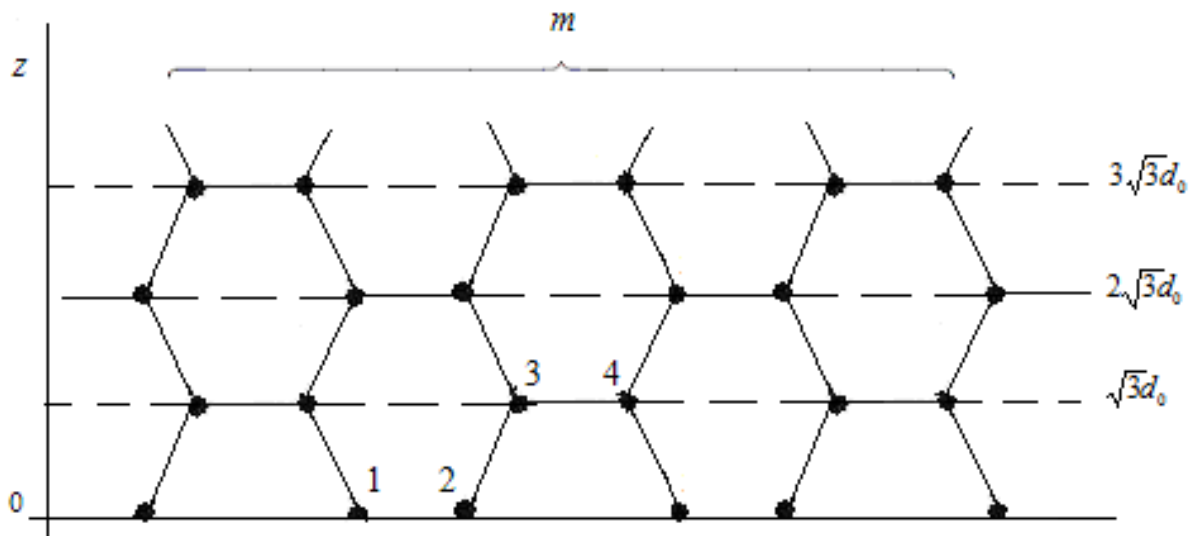


Рисунок 17 – Схема углеродной нанотрубки с «зубчатой» структурой

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

$$\begin{aligned} x_i^{1,2} &= R \cdot \cos \varphi \\ (12) \quad y_i^{1,2} &= R \cdot \sin \varphi \\ z_i^{1,2} &= \sqrt{3}d_0 \cdot (j-1), \quad j=1:n, \end{aligned}$$

где j- номер слоя,

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

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

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

На втором шаге, координата вершины 3 вычисляется по формулам:

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

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

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

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

и соответственно координата вершины 4:

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

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

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

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

2.3 Модельный подход к описанию нанотрубки типа «зигзаг»

Структурные характеристики углеродной нанотрубки напрямую зависят от кристаллографической организации графенового слоя, а именно – от его базисной плоскости и симметрии относительно оси предполагаемой свёртки. Геометрия трубки определяется направлением, в котором осуществляется сворачивание плоской гексагональной решётки углерода в цилиндрическую форму. В зависимости от выбранного вектора свёртки можно получить нанотрубки различного типа – с отличающимися физико-химическими свойствами и электронной структурой.

Если процесс сворачивания графенового листа осуществляется вдоль направления, перпендикулярного одной из его граней (точнее, перпендикулярно кристаллографической оси, проходящей вдоль цепочки атомов), то формируется нанотрубка зигзагообразной конфигурации, также известная как nanotube типа «zigzag». Такие трубки обладают характерной периодичностью вдоль своей оси и отличаются высокой симметрией.

На рисунке 18 представлен обобщённый геометрический вид углеродной нанотрубки данного типа, иллюстрирующий закономерность расположения атомов вдоль окружности и вдоль продольной оси цилиндра. Этот тип конфигурации часто используется в численном моделировании и исследованиях, связанных с оценкой механических и электронных свойств наноструктур.

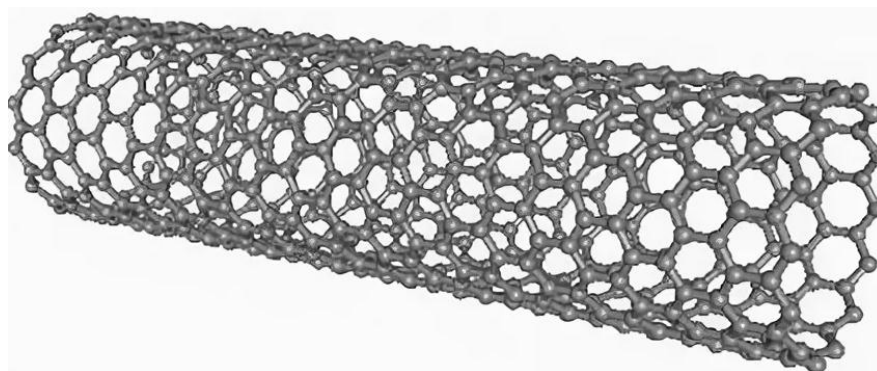


Рисунок 18 – Общий вид нанотрубки со структурой типа «зигзаг»

Развернутый в пленку атомный каркас углеродной нанотрубки со структурой «зигзаг» представлены на рисунке 19.

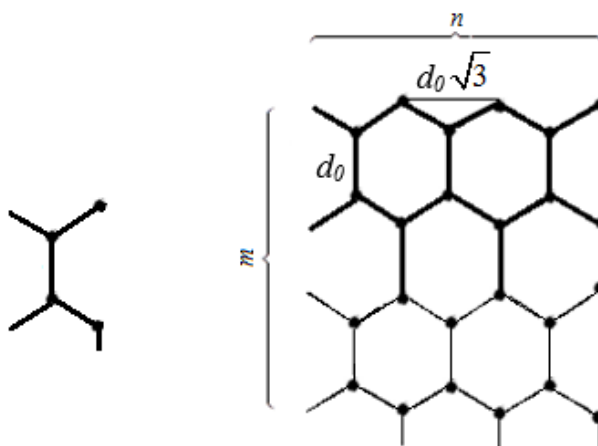


Рисунок 19 – Изображение атомного каркаса углеродной нанотрубки

Для нанотрубок с зигзагообразной конфигурацией ширина элементарной ячейки вдоль оси трубки определяется выражением $d = d_0 * \sqrt{3}$, где $d_0 = 0,142$ нм – это минимальное расстояние между соседними атомами углерода в плоскости графена. Это расстояние является фундаментальной структурной константой и служит основой для расчёта пространственного положения атомов в моделируемой нанотрубке.

Чтобы описать геометрию нанотрубки в трёхмерном пространстве, её удобно представить как совокупность идентичных кольцевых слоёв, расположенных перпендикулярно оси трубки. Каждый такой слой содержит строго определённое число атомов углерода, расположенных по окружности с равными угловыми интервалами. При последовательном наложении этих колец с постоянным шагом вдоль оси формируется цилиндрическая структура нанотрубки.

Для создания графической модели нанотрубки и её последующего моделирования необходимо задать начальные геометрические параметры. Ключевым из них является расстояние между соседними атомами углерода в графеновой плоскости – $d_0 = 0,142$ нм, которое используется в расчётах. Число элементарных ячеек по окружности обозначается как n и определяет количество атомов в одном кольце. Радиус нанотрубки R вычисляется на основе значений

n и n_0 . Длина трубки зависит от количества слоёв вдоль оси, обозначаемого как m , которое определяет общее число кольцевых повторов.

При нахождении R необходимо учитывать, что сторона x правильного n -угольника (рисунок 20) 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:

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

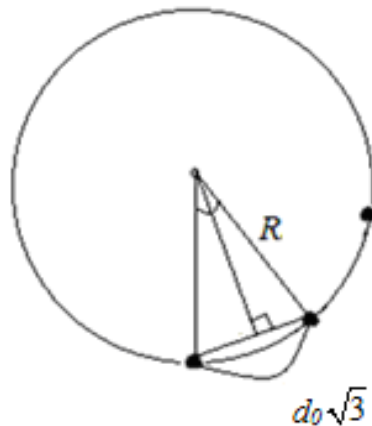


Рисунок 20 – Геометрическая иллюстрация нахождения стороны правильного n -угольника

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

Координаты вершин 1 и 2 шестиугольников (рисунок 21), расположенных на верхнем кольце и рассчитываются в цикле по формулам:

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

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

$$z_i = d;$$

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

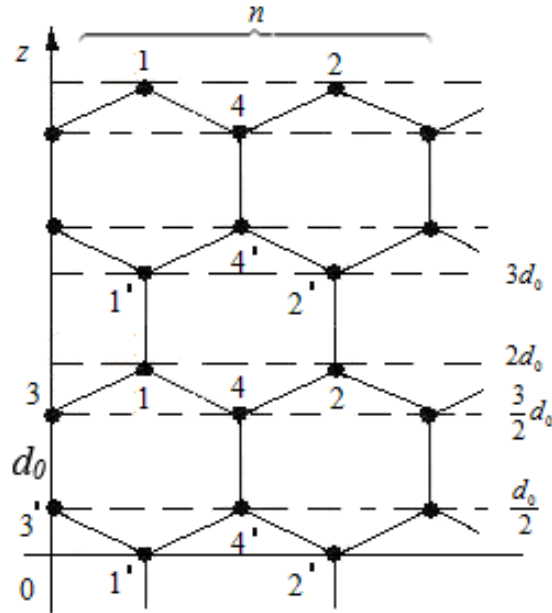


Рисунок 21 – Схема углеродной нанотрубки с зигзагообразной структурой

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 – это порядковый номер атома, принимающий значения от 1 до $2n+1$ с шагом 2. При этом атомы, обозначенные как $3'$ и $4'$, находятся на расстоянии, равном длине химической связи, от соответствующих атомов 3 и 4. Эти точки ($3'$, $1'$, $4'$) представляют собой зеркальное отображение атомов 3, 1 и 4 соответственно.

На следующем этапе построения модели в текущем цикле соединение точек отрезками (связями) не выполняется – это действие откладывается до

следующего шага. Следуя схеме, изображенной на рисунке 13, можно определить закономерность по координате z : если z -координаты атомов $1'$, $2'$ и аналогичных равны нулю, то атомы $3'$, $4'$ и им подобные располагаются на высоте $\frac{1}{2}d_0$. Далее атомы 3 , 4 и прочие аналогичной группы имеют координату $z = \frac{1}{2}d_0$, а атомы 1 , 2 и так далее – $z = 2d_0$.

2.4 Общий алгоритм построения математических моделей ахиральных углеродных нанотрубок

На базе математических моделей ахиральных углеродных нанотрубок предложен универсальный способ визуализации их 3D-структуры. Он обеспечивает не только наглядное отображение геометрии, но и пригоден для дальнейшего численного анализа и оценки свойств материала.

В рамках модели нанотрубка рассматривается как пространственная решётка, где атомы соединены упругими стержнями, имитирующими силы межатомных связей. Метод объединяет атомарный уровень описания с подходами классической механики деформируемых тел, что позволяет точнее предсказывать отклик структуры на внешние нагрузки.

Ахиральные углеродные нанотрубки представляют собой особый класс углеродных структур, которые не обладают хиральностью, то есть их геометрическое строение симметрично и не имеет "завихрения" характерного для хиральных форм. Такие структуры важны в области нанотехнологий и материаловедения, поскольку обладают уникальными механическими и электронными свойствами.

Конструирование математической модели ахиральных нанотрубок требует анализа периодической структуры графена и принципов его свертывания в цилиндрическую форму. Основными параметрами здесь являются количество ячеек в кольце (слое) n , количество колец (слоев) m , а также минимальное расстояние между соседними атомами углерода в плоскости графена $d_g = 1,422 \text{ \AA}$, где $\text{\AA}$ – ангстрем ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$).

Для математического описания ахиральных нанотрубок необходимо учитывать несколько ключевых факторов:

– геометрическая структура. Углеродные нанотрубки представляют собой свёрнутые в цилиндр листы графена – одноатомного слоя углерода, в котором атомы расположены в виде гексагональной (шестигранной) решётки. Каждый атом углерода соединён с тремя соседями, образуя равные по длине связи. Ахиральные нанотрубки имеют строго определённую симметрию и классифицируются по индексу вида « n , 0» (зигзагообразные) или « n , n » (рулонного типа). Благодаря высокой симметрии их геометрия поддаётся формальному описанию с использованием параметров графеновой решётки.

– параметры атомных взаимодействий. На свойства нанотрубки существенно влияют расстояния между ближайшими атомами, кривизна поверхности и углы между химическими связями. В плоской структуре графена длина связи и углы между ними постоянны, однако при сворачивании листа в цилиндр часть этих параметров может изменяться. Особенно это заметно при малых радиусах трубки, когда возникают локальные напряжения и незначительные искажения углов. Кривизна цилиндрической поверхности также приводит к перераспределению механических напряжений и может влиять на электронную структуру.

– оптимизация радиусов. В моделях, учитывающих многослойность нанотрубок (например, в двустенных структурах), важно правильно задать радиусы внутренних и внешних слоёв. Радиус нанотрубки определяется исходя из её симметрии и индексов структуры, а межслоевой интервал, как правило, приближается к расстоянию между слоями в графите и составляет около 0,34 нанометра. Внутренний радиус рассчитывается с учётом толщины углеродного слоя, а внешний – путём прибавления межслоевого расстояния. Также в рамках модели учитывается количество атомов, формирующих трубку, которое напрямую зависит от выбранных индексов симметрии и длины трубки. Масса нанотрубки определяется через произведение числа атомов на массу одного атома углерода.

Алгоритм построения модели включает следующие основные шаги, описанные ниже. Сперва происходит инициализация параметров, устанавливаются n, m и d_g , определяя начальную структуру нанотрубки. При расчёте радиуса r_c используется формула $r_c = \frac{d_g \cdot \sqrt{3}}{2}$, корректирующая минимальное расстояние между атомами. При условии $b_{dep} = 0$, r_c получает одно из возможных значений (0,25 или 0,773).

Далее необходимо определить угловые параметры. Вычисляются α и β , отражающие наклон связей между атомами. Углы учитывают пространственное расположение атомов в гексагональной решетке.

Определение радиуса нанотрубки. Вычисляется R по зависимости от параметров симметрии. Радиусы внутренних и внешних границ определяются как $R_{in} = r - 0,773$ и $R_{out} = r + 0,773$.

Расчёт массы и количества атомов. Общее число атомов $N = 4 * m * n$. Масса M определяется по формуле $M = \frac{N}{1,65 * 10^{-27}}$.

Итоговые параметры M, N, R_{in}, R_{out} фиксируются.

Схема алгоритма построения нанотрубки, приведённый на рисунке 22, иллюстрирует пошаговый процесс расчёта её параметров. В начале пользователь задаёт исходные данные: количество ячеек в кольце (обозначено как n) и количество колец вдоль оси трубки (m). Основу расчёта составляет расстояние между атомами углерода в графеновой плоскости $d_0 = 0,1422$ нм.

В зависимости от конфигурации трубки (зигзаг или кресло), переменной k присваивается соответствующее значение: 0,25 или 0,773. Далее с использованием тригонометрических выражений вычисляются углы α и β , определяющие ориентацию атомов на цилиндрической поверхности, а также радиус нанотрубки R , исходя из геометрических зависимостей.

Циклическая часть алгоритма отвечает за последовательный расчёт углового положения каждого кольца вдоль оси трубки. Итоговые значения включают:

- общее число атомов в структуре N ,
- массу нанотрубки M , рассчитанную по заданной формуле,
- внутренний и внешний радиусы нанотрубки R_{in} и R_{out} , определяемые как $r \pm 0,773\text{нм}$.

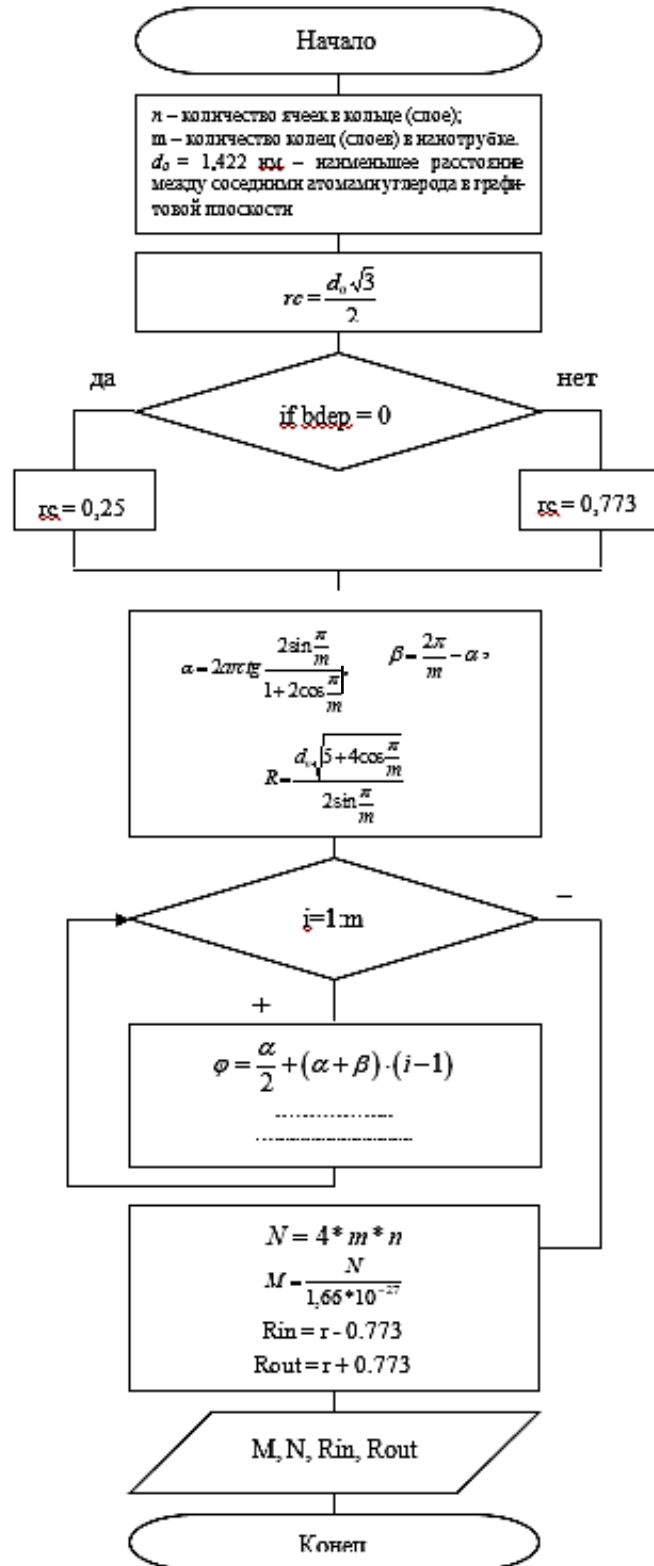


Рисунок 22 – Алгоритм построения углеродной нанотрубки

Представленный алгоритм моделирования ахиральных углеродных нанотрубок обладает рядом существенных достоинств, обеспечивающих его практическую применимость и научную ценность. Одним из основных преимуществ является высокая точность расчётов геометрических параметров нанотрубки. Благодаря использованию строго определённых соотношений, основанных на гексагональной структуре графена, алгоритм позволяет воспроизводить структуру нанотрубки с высоким уровнем детализации, что особенно важно при теоретическом анализе и подготовке данных для численного моделирования.

Алгоритм также базируется на математически выверенных выражениях, соответствующих экспериментально установленным значениям длины углерод-углеродных связей и типовых межатомных расстояний. Это делает модель надёжной и воспроизводимой в различных исследовательских сценариях. Кроме того, универсальность подхода позволяет применять его не только к однослойным, но и к многослойным нанотрубкам, варьируя параметры структуры в зависимости от числа слоёв, диаметра и длины трубки. Тем самым обеспечивается гибкость модели в задачах структурного и механического анализа.

Однако, несмотря на указанные достоинства, алгоритм имеет и определённые ограничения, которые необходимо учитывать при его применении. Наиболее значимым недостатком является отсутствие учёта квантовых эффектов. На наноуровне поведение электронов, взаимодействие между слоями и энергетические свойства материала во многом определяются квантово-механическими законами. Пренебрежение этими аспектами может привести к упрощённой или частичной картине поведения наноструктуры в реальных условиях. Кроме того, алгоритм предполагает идеальные условия формирования нанотрубки: абсолютную симметрию, отсутствие внешних воздействий и дефектов. Такие условия редко встречаются в реальных экспериментальных условиях, где температура, давление, механические нагрузки и наличие примесей могут оказывать значительное влияние на итоговую структуру. Отсутствие механизмов учёта этих факторов ограничивает применимость модели

для анализа поведения нанотрубок в реальных технологических средах. Также стоит отметить, что алгоритм недостаточно эффективен при моделировании нестандартных структур, таких как нанотрубки с топологическими дефектами, изгибами, разрывами или примесями. Для таких задач требуется расширение модели или применение более сложных подходов, включающих, например, молекулярную динамику или методы квантовой химии.

Таким образом, несмотря на ряд ограничений, разработанный алгоритм предоставляет прочную методологическую основу для моделирования ахиральных нанотрубок. Его применение особенно оправдано в задачах, связанных с первичной геометрической генерацией структуры, а также в ситуациях, где требуется быстрое и формализованное построение модели. Однако для более полного анализа, включающего учёт реальных условий, необходимо вносить соответствующие корректировки или интегрировать алгоритм в более сложные вычислительные схемы.

3 РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО СРЕДСТВА ВИЗУАЛИЗАЦИИ НАНОТРУБОК

3.1 Анализ существующих программных решений в области визуализации наноструктур

Современная научная визуализация выступает важным направлением в развитии прикладных и фундаментальных исследований, позволяя преобразовывать многослойные цифровые данные в интуитивно понятные графические формы. Это неотъемлемый элемент анализа, особенно в условиях увеличения объёмов симуляционных, экспериментальных и вычислительных данных. Программы, используемые в научной визуализации, отличаются не только по функционалу, но и по научной направленности: от биоинформатики до материаловедения.

Одним из мощнейших инструментов научной визуализации является ParaView – открытая платформа, разработанная совместно Kitware, Sandia National Labs и Los Alamos National Labs. Она позволяет обрабатывать и визуализировать данные размером в сотни гигабайт и поддерживает параллельные вычисления. ParaView активно применяется в аэродинамике, гидродинамике, визуализации распределения тепловых потоков и других инженерных задачах.

Другим широко используемым решением является VisIt, созданный в Lawrence Livermore National Laboratory. Инструмент ориентирован на визуализацию больших объёмов данных, полученных при численном моделировании сложных физических процессов. VisIt активно применяется в вычислительной физике, астрономии и геофизике. Он поддерживает как 2D, так и 3D визуализацию, а также позволяет создавать интерактивные сценарии визуального анализа.

В области биомедицинских исследований значительное распространение получило программное обеспечение 3D Slicer. Это открытая платформа, предназначенная для анализа и визуализации медицинских изображений

(МРТ, КТ, ПЭТ), реконструкции анатомических структур и планирования хирургических вмешательств. Благодаря модульной архитектуре и поддержке Python, 3D Slicer легко адаптируется под конкретные задачи.

Для анализа атомной и молекулярной структуры применяются такие инструменты:

– Avogadro (рисунок 23), кроссплатформенный редактор молекул, который используется для подготовки входных данных к квантово-химическим расчётам, а также для визуализации геометрии молекул и электронных орбиталей;

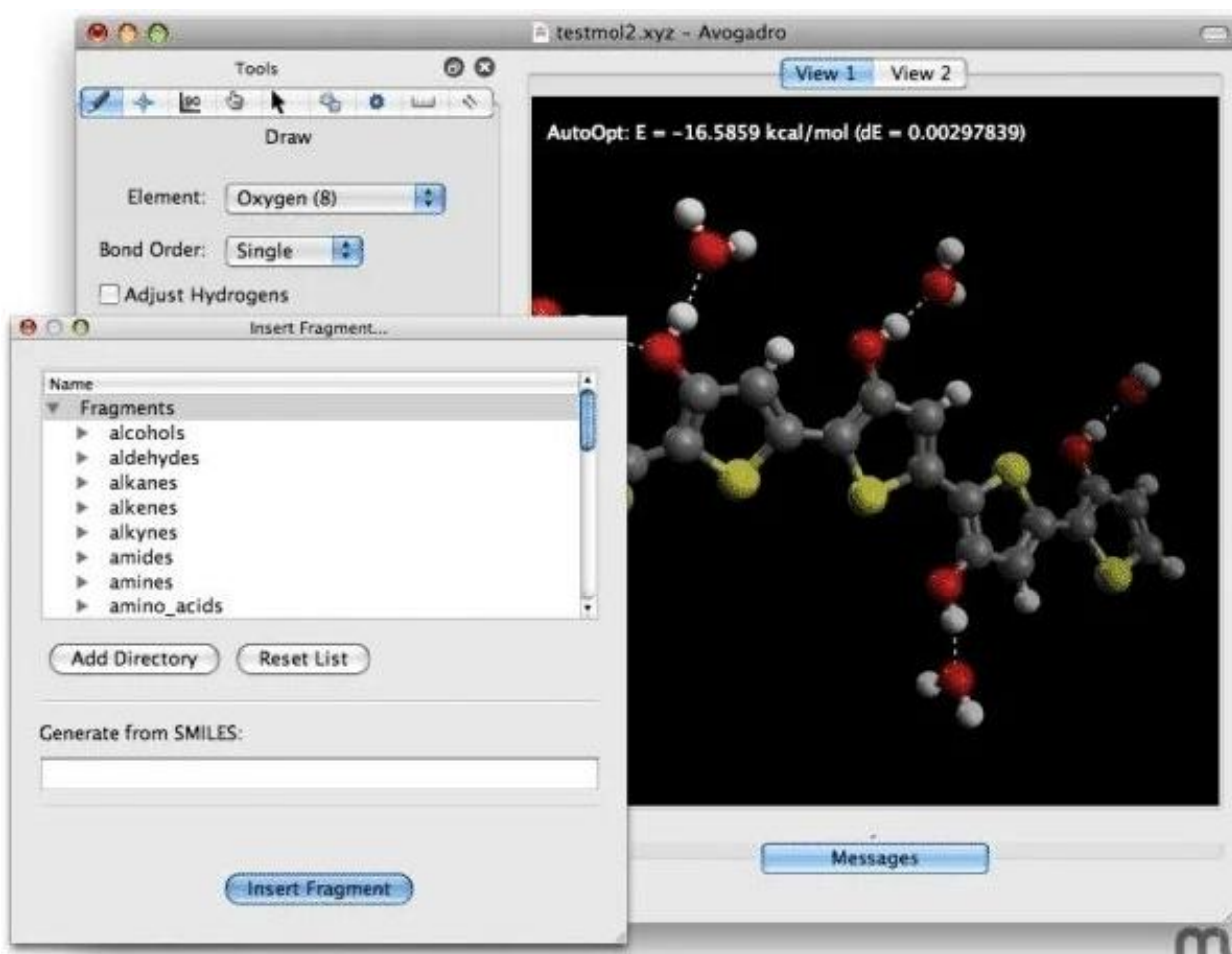


Рисунок 23 – Avogadro, кроссплатформенный редактор молекул

– VMD (рисунок 24) разработан Иллинойским университетом и предоставляет инструменты для работы с большими биомолекулярными системами, моделирования и визуализации молекулярной динамики;

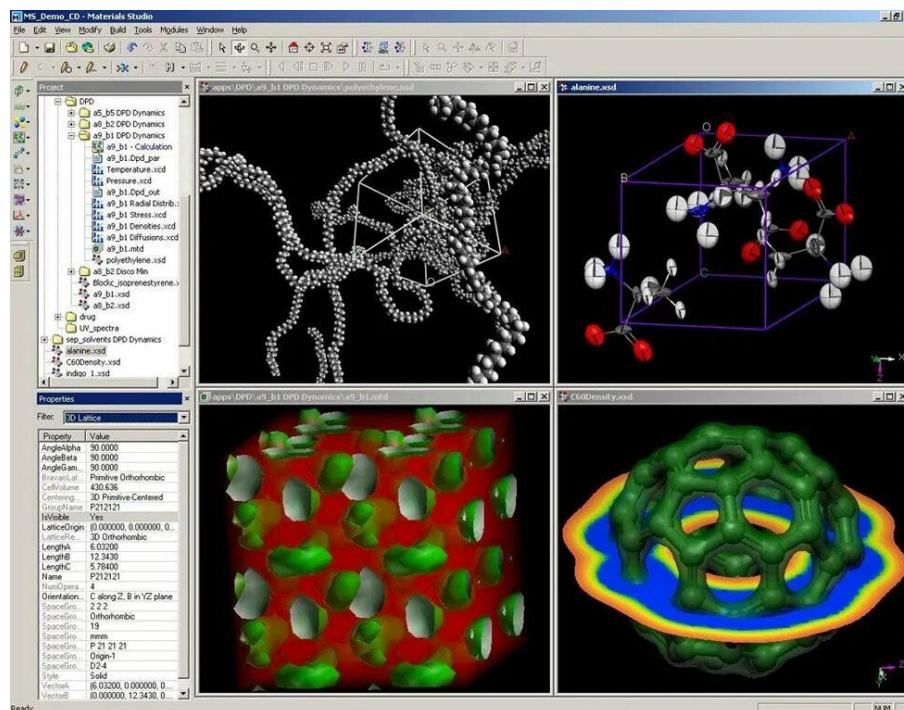


Рисунок 24 – VMD, Визуальная Молекулярная Динамика

– PyMOL (рисунок 25) широко применяется в структурной биологии, в том числе для визуализации белков, лигандов и плотностей электронной плотности, полученных методом рентгеноструктурного анализа или криоэлектронной микроскопии;

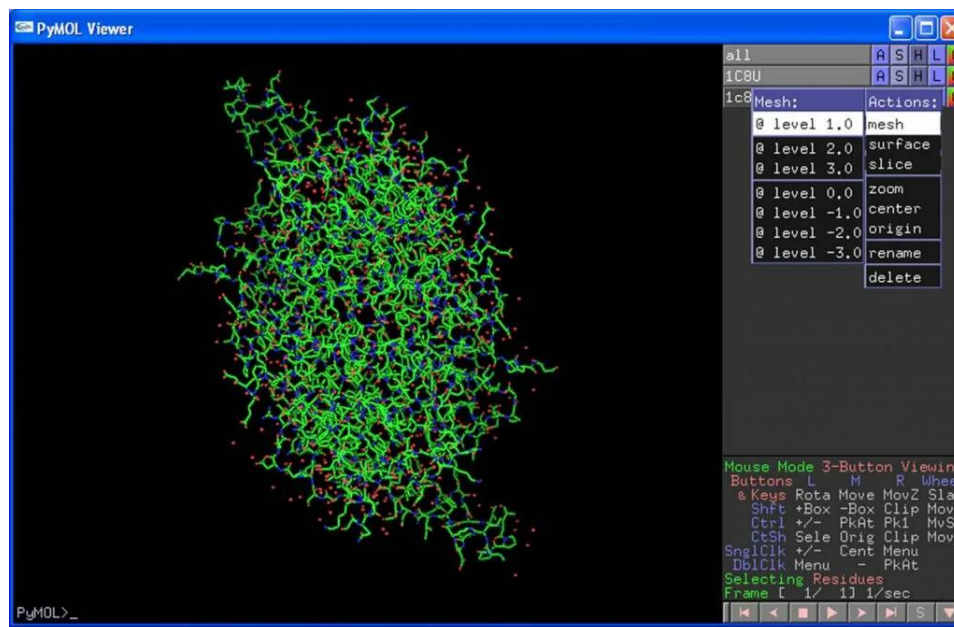


Рисунок 25 – PyMOL, система визуализации молекул

В физике плазмы, астрофизике и прикладной математике используются такие фреймворки:

- OpenDX отличается гибкостью в создании сложных визуальных пайплайнов, где можно настраивать каждый этап преобразования данных;

- Tecplot обеспечивает не только графическое отображение полей и поверхностей, но и детальный численный анализ, включая интегралы, градиенты и срезы данных.

Особое место занимает платформа Blender, изначально созданная для компьютерной графики, но активно используемая в научной визуализации благодаря мощным возможностям по 3D-моделированию и анимации. Расширения, такие как Molecular Nodes и SciVis add-ons, позволяют использовать Blender для визуализации молекулярных структур, клеточных процессов и физических симуляций.

В геонауках активно применяются:

- GMT обеспечивает построение высокоточных карт, визуализацию сейсмических данных, температурных и геофизических аномалий;

- QGIS служит мощной ГИС-платформой для анализа пространственных данных и поддерживает 3D визуализацию ландшафтов и подповерхностных структур.

Для визуализации наноструктур и квантово-механических расчетов перспективными являются:

- Jmol, легковесное Java-приложение для отображения кристаллических структур и молекул, доступное в веб-браузере;

- ASE, использующее Python, интегрируется с популярными пакетами (VASP, Quantum ESPRESSO, GPAW), позволяя не только строить модели, но и управлять симуляциями;

- VESTA поддерживает работу с плотностями электронной плотности, векторами магнитного момента и топологией электронных состояний.

Одним из универсальных решений в современном исследовательском процессе стало использование Jupyter Notebook с библиотеками matplotlib, Plotly, Mayavi и pyvista. Эти инструменты позволяют объединять численные

расчёты, визуализацию и документацию в одной интерактивной среде, что особенно важно в образовательных и коллаборативных проектах.

Среди интегрированных платформ стоит отметить KNIME и Orange, которые в сочетании с визуализацией данных обеспечивают визуальное программирование рабочих процессов в области data science и машинного обучения. Это делает их удобными для междисциплинарных команд, где важна не только точность анализа, но и его наглядное представление.

3.2 Архитектура и функциональные возможности разработанной программы

Среда MATLAB (сокращение от MATrix LABoratory), разработанная и поддерживаемая компанией MathWorks, представляет собой мощную и универсальную платформу, предназначенную для выполнения технических и научных вычислений. На протяжении нескольких десятилетий MATLAB остаётся стандартом де-факто во многих областях прикладной математики, инженерии, физики, информатики и других технических дисциплин благодаря своей высокой производительности, богатому функционалу и широким возможностям визуализации данных.

Главной особенностью MATLAB является его глубокая интеграция с матричной алгеброй. С момента своего создания MATLAB был ориентирован на эффективную обработку матриц и векторных структур, что делает его особенно удобным для решения задач линейной алгебры, численного моделирования и анализа данных. Современные версии среды существенно расширили этот базовый функционал, предоставляя разработчикам инструменты для построения моделей динамических систем, анализа сигналов и изображений, разработки нейросетей, символьной математики и машинного обучения.

MATLAB представляет собой не только язык программирования, но и полноценную интегрированную среду разработки (IDE), включающую следующие компоненты:

- командное окно для быстрого выполнения команд и интерактивного тестирования алгоритмов;

- редактор скриптов и функций с поддержкой подсветки синтаксиса, отладки, профилирования и автоформатирования кода;
- рабочее пространство для отслеживания переменных, загруженных в память;
- инструменты визуализации данных, позволяющие строить как простые графики, так и сложные трёхмерные и анимационные представления результатов;
- средства построения пользовательских интерфейсов (GUI), в том числе GUIDE и App Designer;
- интерфейсы для интеграции с внешними языками программирования, включая C/C++, Java, Python и др.

Одной из ключевых черт MATLAB является его модульная архитектура, реализованная через систему так называемых тулбоксов (Toolboxes) – специализированных библиотек функций и классов, ориентированных на решение задач в конкретной предметной области. На сегодняшний день доступно более ста официальных пакетов расширения. Среди наиболее часто используемых можно выделить:

- Image Processing Toolbox – инструменты обработки изображений;
- Signal Processing Toolbox – анализ и фильтрация сигналов;
- Control System Toolbox – синтез и анализ систем управления;
- Neural Network Toolbox – построение и обучение искусственных нейросетей;
- Simulink – визуальная среда для моделирования динамических систем и схем.

Особое внимание в MATLAB уделяется визуализации результатов вычислений, что крайне важно для анализа сложных многомерных данных. Основным инструментом построения двумерных графиков является функция plot, позволяющая наглядно представить данные в виде линий с различными параметрами отображения (цвет, тип линии, маркеры). Строковые аргументы

формата (например, «г – о») позволяют гибко комбинировать стили отображения. Помимо этого, MATLAB предоставляет более детализированную настройку графиков через пары «свойство – значение», что даёт полный контроль над визуальными характеристиками (толщина линии, размер и форма маркеров, прозрачность и т.д.).

Для представления многомерных и трёхмерных данных MATLAB предлагает функции `plot3`, `mesh`, `surf`, `contour`, каждая из которых ориентирована на различный способ представления поверхности. Например, `mesh` создаёт прозрачную сетку с окрашенными рёбрами, в то время как `surf` позволяет закрашивать как грани, так и ячейки, что даёт более насыщенную и контрастную визуализацию. Средства широко применяются при построении моделей в инженерных дисциплинах и естественных науках, особенно там, где требуется детализированное отображение поверхностей и пространственных распределений параметров.

Разработка пользовательских интерфейсов (GUI) в MATLAB может осуществляться с помощью среды GUIDE (устаревший инструмент, сохраняющий актуальность в ряде задач) и более современной среды App Designer, предоставляющей богатый набор визуальных компонентов и событийно-ориентированную модель программирования. Это позволяет создавать полнофункциональные интерактивные приложения без необходимости использовать сторонние фреймворки.

Стоит также отметить высокую степень открытости среды. Встроенные функции часто сопровождаются открытым исходным кодом, что позволяет не только изучать реализованные алгоритмы, но и при необходимости адаптировать их под собственные задачи. Интерпретируемый синтаксис языка MATLAB делает код читаемым и легко сопровождаемым, а поддержка объектно-ориентированного программирования расширяет возможности структурирования крупных проектов.

Дополнительным преимуществом среды является поддержка различных вариантов организации программного кода: скрипты (однолинейные или многострочные команды, исполняемые в общем пространстве), функции (модули с изолированным рабочим пространством) и pre-parsed файлы – специальные компилируемые скрипты.

Наконец, MATLAB активно развивается: в новых релизах появляются модули для работы с большими данными, параллельными вычислениями, искусственным интеллектом, интернетом вещей, а также модули интеграции с облачными сервисами. Благодаря этим возможностям MATLAB сохраняет свою актуальность в условиях быстро меняющегося технологического ландшафта и продолжает оставаться ключевым инструментом в арсенале инженеров, учёных и разработчиков.

3.3 Средства и инструменты, использованные при создании программного продукта

На основе анализа математических моделей и вычислительных методов был создан уникальный программный комплекс, предназначенный для трехмерного моделирования и визуализации атомарного строения ахиральных углеродных нанотрубок. Данное программное обеспечение предоставляет исследователям эффективный инструмент для работы с этими перспективными наноматериалами.

Основные функциональные возможности программы включают два важных аспекта. Первый – точный расчет координат атомов в структуре нанотрубки на основе введенных пользователем параметров. Второй – генерацию качественной трехмерной модели, наглядно отображающей пространственное расположение атомов в молекулярной решетке.

Для корректной работы программы требуется стандартный персональный компьютер с операционной системой Windows. Обязательным условием является наличие установленного пакета MATLAB, который обеспечивает необходимые вычислительные мощности и инструменты для визуализации получаемых результатов.

Разработанное решение отличается удобным интерфейсом и оптимизированными алгоритмами обработки данных, что позволяет исследователям эффективно работать с различными конфигурациями нанотрубок, получая точные визуальные модели их атомной структуры. Программа представляет собой ценный инструмент для научных исследований в области наноматериалов. Современные подходы к разработке программного обеспечения сместились от линейного выполнения кода к интерактивным системам, реагирующим на действия пользователя.

Модульный подход предполагает разделение программы на независимые компоненты с четкими интерфейсами взаимодействия. Каждый модуль разрабатывается и тестируется отдельно, что обеспечивает:

- повторное использование кода;
- упрощение разработки и поддержки;
- гибкость модификаций без переработки всей системы.

Функции, как частный случай модульности, инкапсулируют повторяющиеся операции, повышая читаемость и удобство сопровождения кода. Такой подход особенно важен для интерактивных приложений, где критичны быстрая адаптация и отзывчивость на действия пользователя.

Структура программного продукта представлена на рисунке 26.

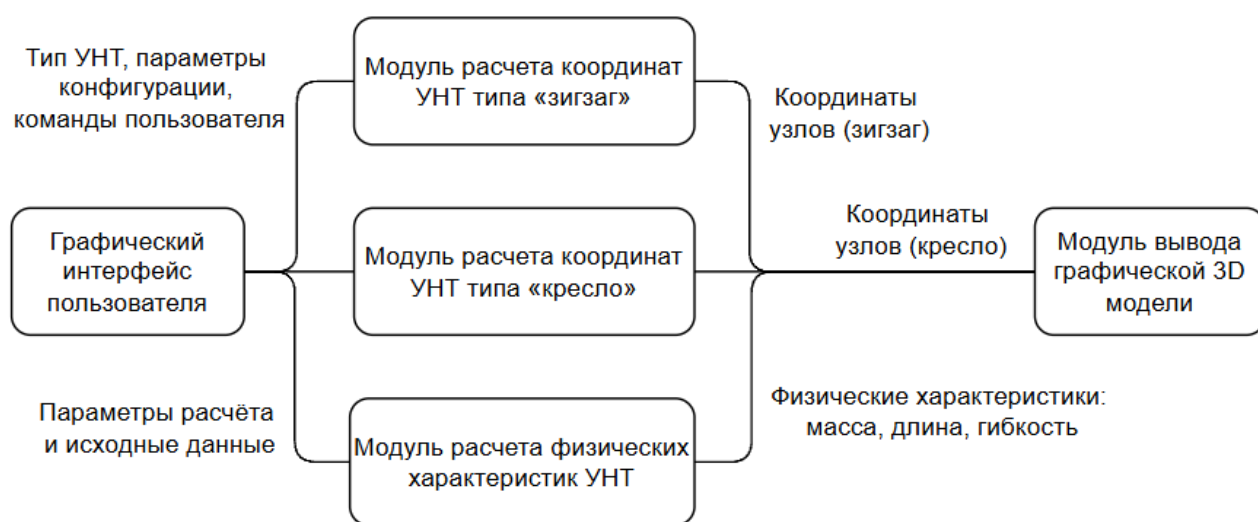


Рисунок 26 – Модульная структура программного продукта

Разработанное приложение использует стандартный формат XYZ для описания атомной структуры нанообъектов, что обеспечивает совместимость с большинством вычислительных инструментов в области нанотехнологий. Простота интерфейса позволяет исследователям быстро освоить работу с программой без дополнительного обучения. Все необходимые параметры вводятся через единое диалоговое окно, что делает процесс настройки модели интуитивно понятным. Для проверки корректности работы программы были выполнены тестовые расчеты, подтвердившие точность визуализации и надежность алгоритмов. Пользовательский интерфейс включает стандартное меню с разделами «Файл» и «Помощь». В разделе «Файл» доступны функции сохранения и загрузки данных, что упрощает работу с различными конфигурациями нанотрубок.

Для визуализации атомных каркасов углеродных нанотрубок разработаны специализированные алгоритмы, учитывающие особенности их структуры. В частности, реализованы методы построения моделей для двух основных типов нанотрубок: «зиг-заг» и «кресло», также, для сравнения, на рисунке 27 демонстрируется визуализация фрагмента углеродной нанотрубки средствами Octave/Matlab. Алгоритмы обеспечивают точное отображение геометрии связей между атомами, сохраняя при этом высокую скорость расчетов.

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;
    surf(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 $a/2$. Расчет координат точек выполняется с использованием тригонометрических функций, где параметр r определяет радиус кольца, а угловой шаг между точками составляет π/n радиан. Каждая итерация цикла обрабатывает пару точек: первая точка размещается на высоте d

+ $rc/2$, вторая - на высоте $d + 3/2*rc$, после чего они соединяются толстой черной линией с помощью функции plot3.

Для визуализации поверхности применяется функция surf, которая строит трехмерную поверхность с освещением, при этом координаты корректируются добавлением компонент $xc.*rc$, $yc.*rc$ и $zc.*rc$.

```

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;
surf(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

```

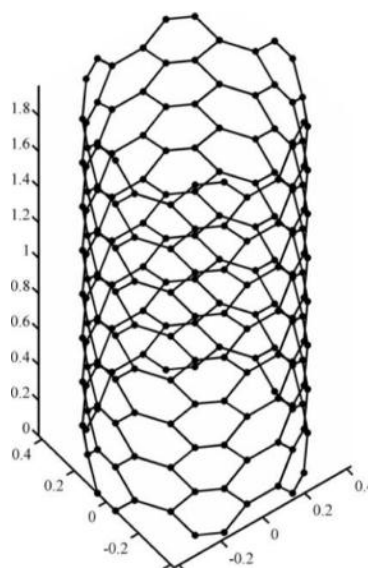


Рисунок 27 – Визуализации фрагмента углеродной нанотрубки средствами Octave/Matlab

```

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;
surfl(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;
surfl(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 конфигурацией представлены на рисунке 28 и демонстрируют характерное для данного типа структур пространственное расположение атомов. Как видно из визуализации, атомы углерода упорядочены вдоль цилиндрической поверхности таким образом, что образуют характерную «зигзагообразную» цепочку, направленную вдоль оси трубки. Такое расположение обусловлено особенностями геометрической свёртки графенового листа, при которой направление сворачивания перпендикулярно одному из векторов кристаллической решётки графена.

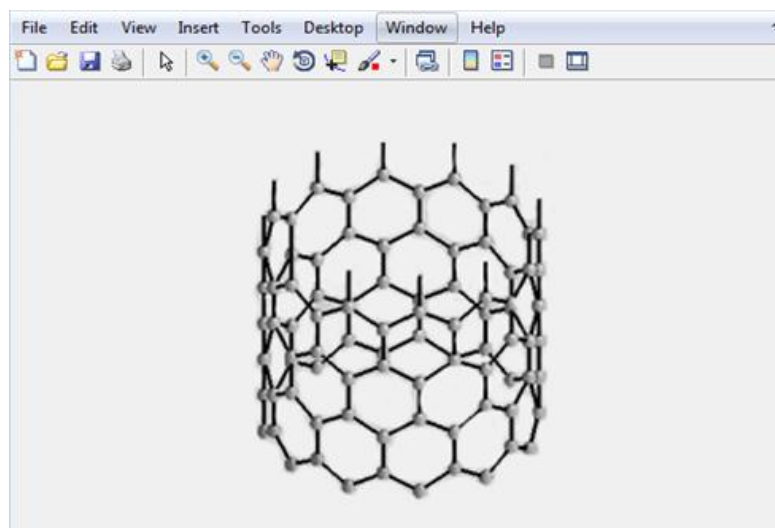


Рисунок 28 – Результаты графического вывода углеродной нанотрубки с зигзагообразной структурой

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);
    end
end
```

```

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
end
shading interp, colormap(gray),
axis('equal'),
axis off,

```

Результаты графического моделирования углеродной нанотрубки с зубчатой структурой (также известной как «кресельная» или armchair-конфигурация) представлены на рисунке 29. Данная визуализация отражает характерное для этой структуры расположение атомов углерода вдоль цилиндрической поверхности трубки, где атомы формируют равномерные ряды, напоминающие форму кресла. Это название обусловлено тем, что при проекции на плоскость последовательность атомов напоминает ступенчатую, «зубчатую» форму.

Особенностью этой конфигурации является высокая симметрия и равномерное распределение межатомных связей, что оказывает существенное влияние на физико-химические свойства структуры. В частности, нанотрубки

типа armchair демонстрируют металлическое поведение, что делает их особенно перспективными для использования в нанoeлектронике и в качестве токопроводящих элементов в нанокompозитах.

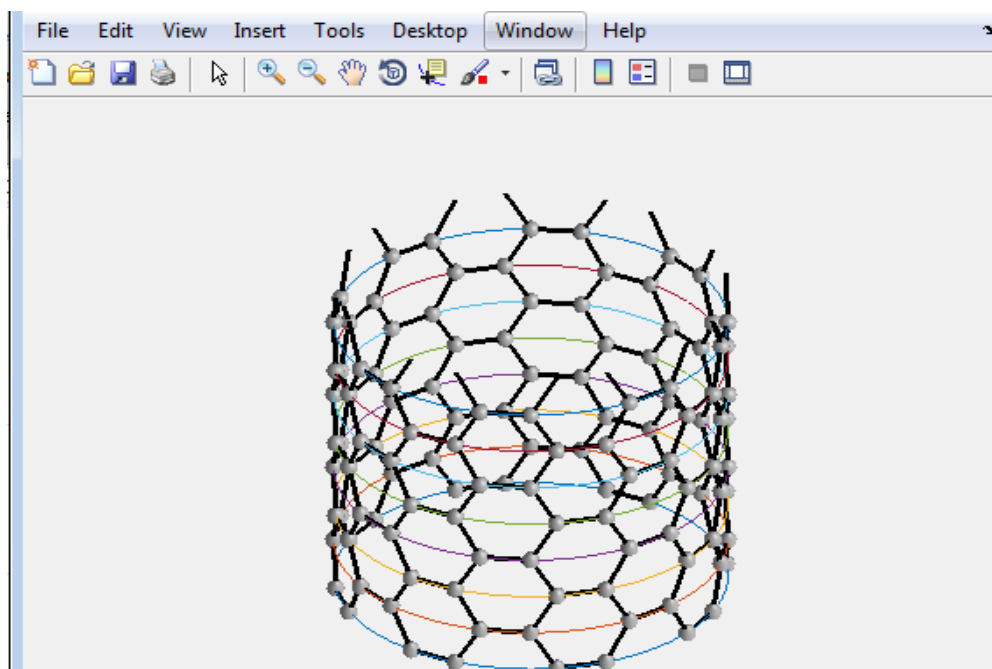


Рисунок 29 – Результаты графического вывода углеродной нанотрубки с зубчатой структурой

Современные методы моделирования наноструктур требуют точного отображения атомного строения. Для этого применяется сферическое представление атомов и цилиндрическое – химических связей, обеспечивающее наглядность и информативность.

Разработанный подход включает гибкий интерфейс для задания параметров нанотрубок. Система автоматически строит 3D-модель на основе введенных данных, используя адаптивный рендеринг для работы со сложными структурами. Атомы отображаются сферами разного размера, связи – цветными цилиндрами, что позволяет четко видеть особенности строения.

Алгоритмы оптимизированы для эффективной работы с крупными молекулярными системами. Динамическая регулировка детализации обеспечивает плавную визуализацию даже сложных структур. Полученные модели полезны как для исследований, так и для образовательных целей:

```

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:

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
    - 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,'defaultUicontrolBack-
groundColor'))
    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,'defaultUicontrolBack-
groundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end
```

Внутренний диаметр, внешний диаметр, чисто 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,'defaultUicontrolBack-
groundColor'))
    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,'defaultUicontrolBack-
groundColor'))
    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,'defaultUicontrolBack-
groundColor'))
    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,'defaultUicontrolBack-
groundColor'))
    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
```

Представленный программный код реализует комплексный подход к моделированию и визуализации атомной структуры углеродных нанотрубок. Алгоритм позволяет создавать точные трехмерные модели как зигзагообразных, так и зубчатых структур, учитывая особенности их кристаллической решетки.

Для углеродной нанотрубки типа «кресло»:

```
try
if (get(handles.radiobutton1, 'Value') == 0)
    m=str2double(get(handles.ncells, 'String'));
% число □чечек в кольце
    n=str2double(get(handles.nrings, 'String'));
% число колец в трубке
    d0=1.422;          % длина химической связи
    bdep = get(handles.checkbox3, 'Value')
    if bdep == 0;
rc=0.250;            % радиус
    else rc=0.773;    % ковалентный радиус частицы
    end
    rs=d0*3^.5/2;      % расстояние между соседними уровнями
    a=2*atan((2*sin(pi/m))/(1+2*cos(pi/m)));
    b=2*pi/m-a;
    r=(d0*(5+4*cos(pi/m)).^5)/(2*sin(pi/m));
    [xc,yc,zc]=sphere;
    for j=1:n;
        for i=1:m;
            q1=a/2+(a+b)*(i-1);
            x1=r*cos(q1); y1=r*sin(q1); z1=2*rs*(j-1);
            surf(xc.*rc+x1, yc.*rc+y1, zc.*rc+z1), axis('equal'),
            hold on
            q2=a/2+b+(a+b)*(i-1);
            x2=r*cos(q2); y2=r*sin(q2); z2=2*rs*(j-1);
            surf(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);
    surf(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);
    surf(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);

```

```

Rin = r - 0.773;

```

```

Rout = r + 0.773;

```

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

```

else

```

```

n=str2double(get(handles.ncells, 'String'));           % число ячеек в кольце

```

```

s=str2double(get(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),
    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 30 – 31.

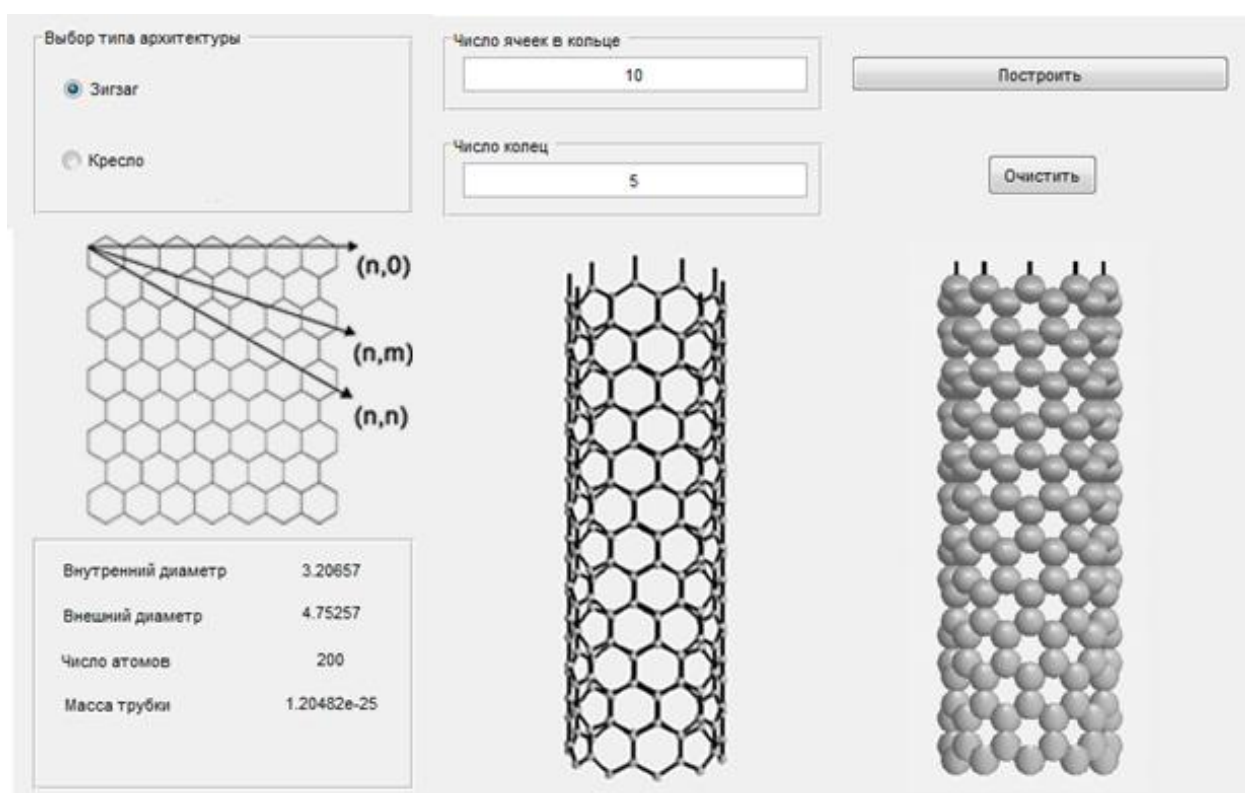


Рисунок 30 – Результаты графического вывода углеродной нанотрубки с зигзагообразной структурой

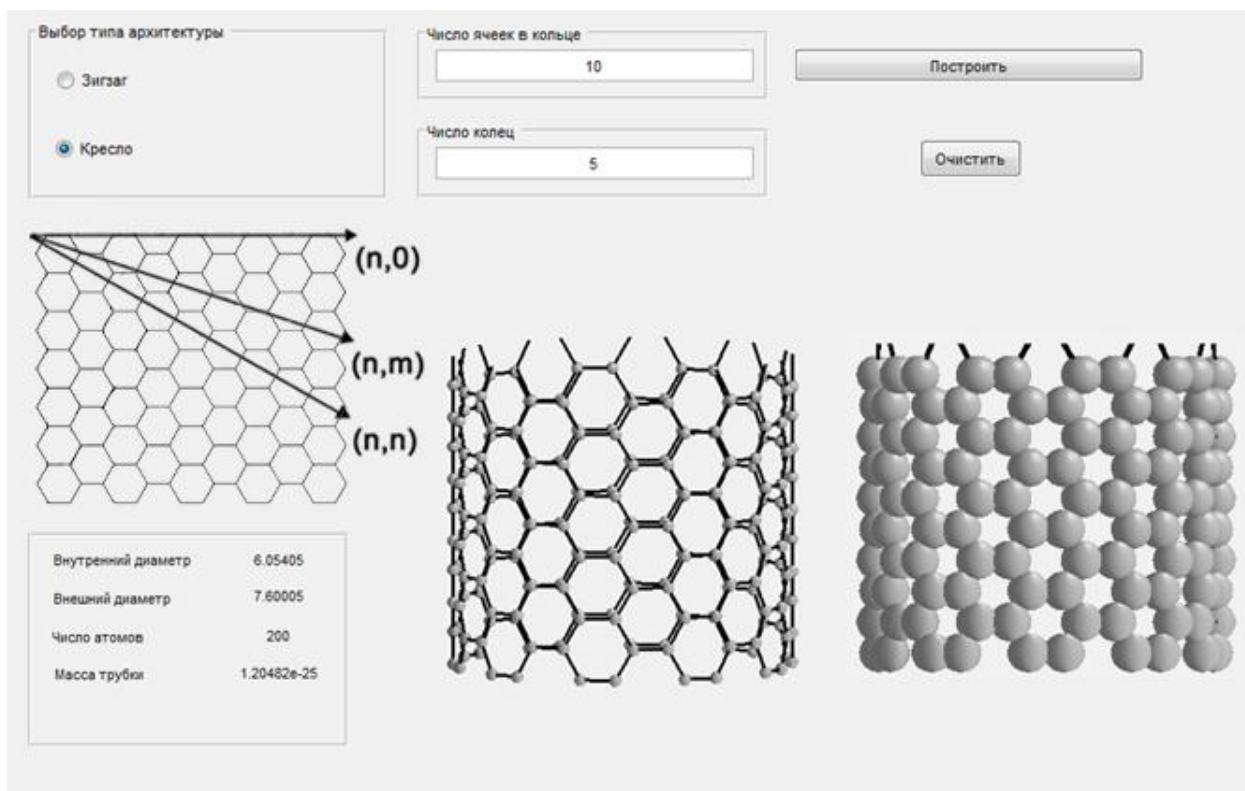


Рисунок 31 – Результаты графического вывода углеродной нанотрубки с зубчатой структурой

Выполненная в рамках настоящего исследования методика компьютерной визуализации ахиральных углеродных нанотрубок не только демонстрирует высокую эффективность в графическом представлении структурных особенностей, но и служит прочной основой для комплексного анализа свойств наноматериалов. Такой подход открывает перспективы для системного изучения зависимости между геометрией и функциональными характеристиками нанотрубок, включая их механические, электронные и тепловые параметры.

Особое значение разработанная методика приобретает в контексте проектирования новых типов композиционных материалов, где использование нанотрубок позволяет задавать строго определённые параметры на микро- и наноуровне. Формируется среда для создания инновационных композитов с программируемыми свойствами, адаптируемыми под конкретные задачи – от повышения прочности до оптимизации электропроводности или теплопереноса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сегодня нанотехнологические открытия занимают ключевое место в эволюции многих отраслей, от медицины до электроники. Особое значение приобретает возможность точного проектирования наноматериалов с заданными свойствами и совершенствование методов их исследования на атомарном уровне. Методы визуализации атомно-молекулярных структур играют ключевую роль в современной науке, обеспечивая взаимосвязь между различными уровнями компьютерного моделирования и позволяя проводить верификацию теоретических предсказаний экспериментальными результатами.

Графическое отображение атомной структуры и электронных свойств аксиальных углеродных нанотрубок предоставляет уникальные возможности для изучения динамики их структурных преобразований при различных физико-химических воздействиях. Подобная визуализация позволяет с высокой точностью определять локализацию и характер атомарных изменений, что существенно углубляет понимание механизмов трансформации наноматериалов.

В ходе проведенного исследования был выполнен критический анализ существующего программного обеспечения для моделирования нанообъектов. В качестве основной платформы разработки выбран математический пакет MATLAB, который благодаря богатому набору встроенных функций и специализированных инструментов визуализации позволяет существенно сократить время реализации вычислительных алгоритмов по сравнению с традиционными языками программирования.

Разработанные в рамках исследования алгоритмы трехмерной визуализации атомных структур углеродных наноматериалов предоставляют новые возможности для анализа их структурных характеристик. Полученные результаты имеют важное прикладное значение, так как позволяют не только изучать свойства существующих нанообъектов, но и целенаправленно проектировать новые материалы нужными параметрами.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- 1 Аллотропия // Большой Энциклопедический словарь // – Режим доступа: <http://dic.academic.ru/dic/nsf/encЗр/52190>. – 29.11.2024.
- 2 Алфимов, М. В. Многомасштабный компьютерный дизайн материалов для оптических хемосенсоров на основе фотонных кристаллов / М. А. Алфимов // 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. – С. 375.
- 4 Артюхов, В. И. Компьютерное моделирование физико-химических свойств наноструктур на основе диоксида кремния и углерода / 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 // Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова. – 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. – С 169.

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. Саникович // 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. – № 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. – 2013. – 188 с.

18 Дьяконов, А. Г. Среда для вычислений и визуализации MatLab: учеб. пособие / А. Г. Дьяконов // – М.: МГУ. – 2010. – Режим доступа: www.exponenta.ru – 15.11.2024.

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

20 Запороцков, П. А. Полупроводящие модифицированные структуры на основе углеродных нанотрубок / П. А. Запороцков // – 2016. – 155 с.

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

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

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

24 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.

25 Латышев, А. Ю. Транспортные свойства углеродных наноструктур на основе графита и многостенных нанотрубок / А. Ю. Латышев // – 2009. – 98 с.

26 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.

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

28 Мартынов, Н. Н. MATLAB 6.5. Вычисления, визуализация, программирование / Н. Н. Мартынов, А. П. Иванов // – 2007. – 336 с.

29 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. – 2016. – 154 с.

30 Матюшкин, И. В. Моделирование и визуализация средствами MATLAB физики наноструктур / И. В. Матюшкин // – 2011. – 168 с.

31 Михайлов, И. С. О программном обеспечении моделирования нанобъектов / И. С. Михайлов // Современные проблемы науки и образования. – 2011. – № 3. – Режим доступа: <http://www.science-education.ru/97-4691>. – 18.012.2024.

32 Назаренко, Н. В. Компьютерное моделирование атомного каркаса углеродных наноструктур / Н. В. Назаренко, И. Е. Еремин, А. А. Остапенко // Ученые заметки ТОГУ. – 2012. – № 2. – С. 8-16.

33 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. – 2024. – С. 66-67.

34 Пасько, А. А. Научная визуализация и ее применение в исследованиях наноструктур / А. А. Пасько, В. В. Пилюгин // – Режим доступа: http://85.142.23.144/packages/mifi/FAAE2D15-986F-4357-BADEC0CA5CDDA01A/1.0.0.0/Pasko_Pilyugin_rus.pdf – 19.02.2025.

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

36 Стриханов, М. Н. Компьютерная визуализация наноструктур / М. Н. Стриханов, Н. Н. Дегтяренко, В. В. Пилюгин, Е. Е. Маликова, Н. А. Матвеева, В. Д. Аджиев, А. А. Пасько // Российские нанотехнологии. – 2010. – № 5-6. – С. 12-13.

37 Сухно, И. В. Углеродные нанотрубки / И. В. Сухно, В. Ю. Бузько. Часть I. Высокотехнологичные приложения. – 2008. – 55 с.

38 Усанов, Д. А. Компьютерное моделирование наноструктур / Д.А. Усанов, А. В Скрипаль, А. В. Скрипаль, А. В. Абрамов // – 2013. – 100 с.

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

40 Халецкая, Т. В. Компьютерное моделирование ахиральных углеродных нанотрубок / Халецкая, Т. В. // Молодёжь XXI века: шаг в будущее. – 2017. – С. 1059-1060.

41 Шашок, Ж. С. Применение углеродных наноматериалов в полимерных композициях / Ж. С. Шашок, Н. Р. Прокопчук // – 2014. – 232 с.