

DOI 10.37539/2949-1991.2025.27.4.017
УДК 004.942

Бурдуковский Данил Витальевич, студент 2 курс,
института компьютерных и инженерных наук,
Амурский государственный университет,
Россия, г. Благовещенск
Burdukovsky D.V., Student 2nd year,
Institute of Computer and Engineering Sciences,
Amur State University, Russia, Blagoveshchensk

Ерёмина Виктория Владимировна,
кандидат физико-математических наук, доцент,
доцент, института компьютерных и инженерных наук,
Амурский государственный университет,
Россия, г. Благовещенск
Eremina V.V. Candidate of Physico-Mathematical Sciences,
Associate Professor, Associate Professor at the Institute of
Computer and Engineering Sciences, Amur State University
Russia, Blagoveshchensk

**ПРОГРАММА ВИЗУАЛИЗАЦИИ АТОМНОГО КАРКАСА
АХИРАЛЬНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК
A VISUALIZATION PROGRAM FOR THE ATOMIC
FRAMEWORK OF ACHIRAL CARBON NANOTUBES**

Аннотация: Статья посвящена разработке программы в системе MATLAB (MATrix LABoratory матричная лаборатория). Данная программа позволяет определять пространственные координаты атомного. Также каркас ахиральных углеродных нанотрубок и выводить графические модели заданных параметров. Кроме того, определена эффективность программы, как инструмента для всестороннего исследования нанообъектов, их проектирования и создания различных материалов с необходимыми характеристиками.

Abstract: The article is devoted to the development of a program in the MATLAB system (MATrix LABoratory matrix laboratory). This program allows you to determine the spatial coordinates of the atomic frame of chiral carbon nanotubes and display graphical models of the specified parameters. In addition, the effectiveness of the program as a tool for a comprehensive study of nanoobjects, their design and the creation of various materials with the necessary characteristics has been determined.

Ключевые слова: визуализация, программа, моделирование, атомный каркас, нанотрубки

Keywords: visualization, program, modeling, atomic framework, nanotubes

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



комплексов, предназначенных для решения научно-технических задач.

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

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

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

Современные методы программирования подразумевают не последовательное выполнение программы, а ее объективную реакцию на действия пользователя. Для удачной реализации этого подхода необходимо применять современные концепции программирования. К ним можно отнести, во первых, концепцию модульного программирования. Ее суть заключается в создании готового программного продукта, который состоит из модулей, и его можно собирать как конструктор. Модуль, в свою очередь, это часть программы, компилируемая отдельно от остальных. Именно возможность отдельной компиляции и является основным преимуществом модулей. Частным случаем модульного программирования является выделение часто повторяющихся кусков кода в функции. Структура программного продукта представлена на рисунке 1.

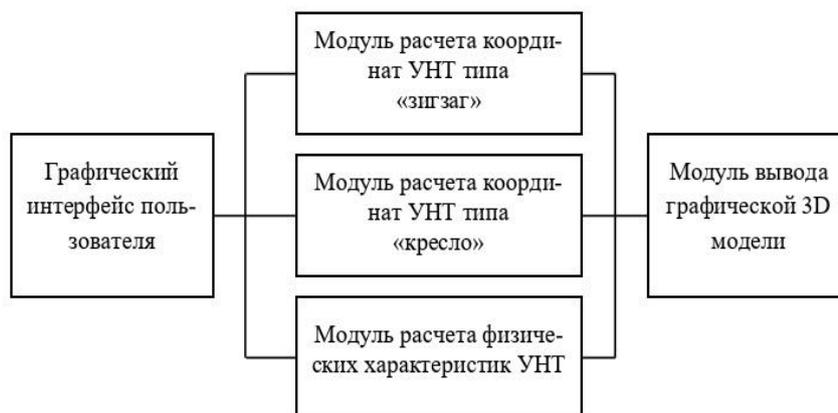


Рисунок 1. Модульная структура программного продукта

В качестве исходных данных в этой программе используют описание исследуемого нанообъекта того или иного типа, представленного в формате XYZ. Разработанное приложение не требует специальной подготовки и просто в использовании. Все необходимые данные вводятся в одном окне. Для проверки эффективной работы разработанного программного комплекса были решены тестовые задачи. Одним из основных элементов разработанного Windows-приложения является меню пользователя. В состав главного меню входят: «Файл» и «Помощь». Пункт меню «Файл» окна ввода исходных данных позволяет сохранять и загружать исходные данные. Предложим следующие алгоритмы создания упрощенной трехмерной модели визуализации атомных каркасов углеродных нанотрубок типа «зигзаг» и «кресло». Результаты графического моделирования углеродной нанотрубки с зигзагообразной структурой представлены на рисунке 2.



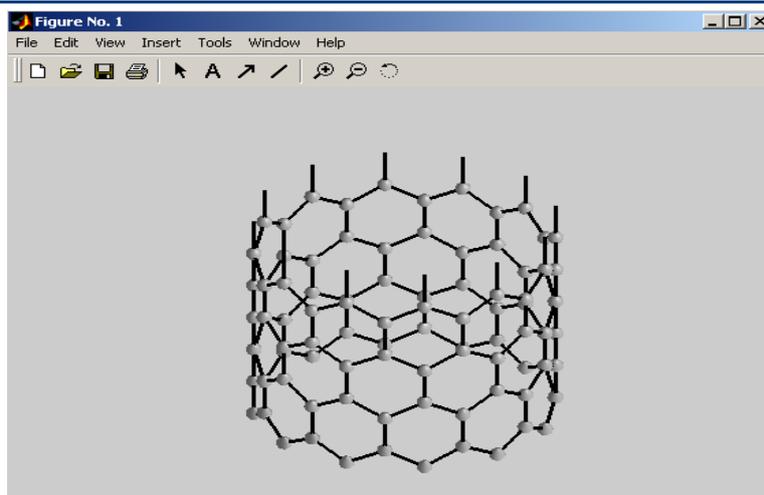


Рисунок 2. Результаты графического вывода углеродной нанотрубки с зигзагообразной структурой

Результаты графического моделирования углеродной нанотрубки с зубчатой структурой представлены на рисунке 3.

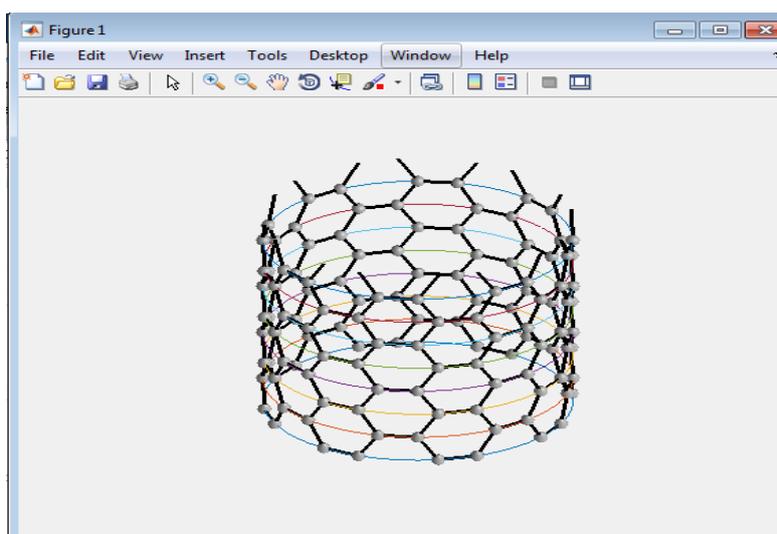


Рисунок 3. Результаты графического вывода углеродной нанотрубки с зубчатой структурой

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

Предложим следующие алгоритмы создания усовершенствованной и более детальной трехмерной модели визуализации атомных каркасов углеродных нанотрубок зигзагообразной и зубчатой структур. Для начала рассмотрим алгоритм организации интерфейса пользователя и построения визуальной модели углеродной нанотрубки задаваемой им конфигурации. Результаты графического вывода углеродной нанотрубки разной конфигурации представлены на рисунках 4-6.



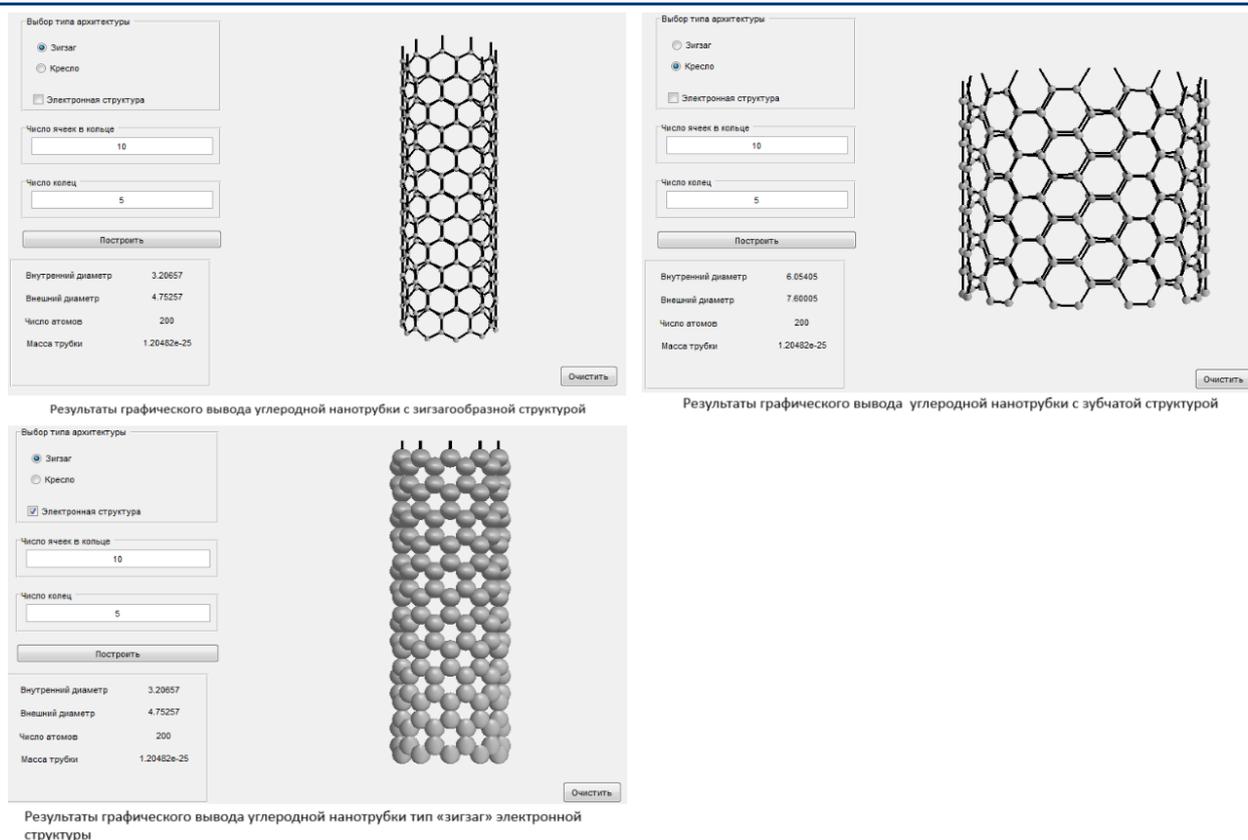


Рисунок 4. Результаты графического вывода углеродной нанотрубки

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

Список литературы:

1. Готлиб И.Б. Молекулярно-динамическое моделирование наноструктур бромида серебра в однослойных углеродных нанотрубках // Физика твердого тела. – 2011. – Т.53. Вып. 11. С. 2256-2264.
2. Карнет Ю.Н. Компьютерное моделирование механических свойств углеродных наноструктур // Изв. РАН. МТТ. - 2010. □ № 4. - С. 121-137.

