

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

ПРОГРАММНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР SOFTWARE VISUALIZATION OF CARBON NANOSTRUCTURES

Аннотация: Статья посвящена разработке разработка алгоритмов визуализации трехмерной модели строения ахиральных углеродных нанотрубок произвольной конфигурации. Представлен алгоритм математического расчета, моделирования на примере структур «зигзаг» и «кресло» через математический расчет их атомного каркаса. Рассмотрена практическая значимость данного продукта в области разработки углеродных материалов. Кроме того, отмечены дальнейшие способы использования алгоритма: создание программного средства для исследования строение и свойства ахиральных углеродных нанотрубок с известным геометрическим законом строения атомной решетки, предусмотрена возможность генерации координат на основании такого закона.

Abstract: The article is devoted to the development of algorithms for visualizing a three-dimensional model of the structure of chiral carbon nanotubes of arbitrary configuration. An algorithm of mathematical calculation and modeling is presented using the example of "zigzag" and "armchair" structures through mathematical calculation of their atomic framework. The practical significance of this product in the field of carbon materials development is considered. In addition, further ways of using the algorithm are noted: the creation of a software tool for studying the structure and properties of achiral carbon nanotubes with a well-known geometric law of atomic lattice structure, the possibility of generating coordinates based on such a law is provided.

Ключевые слова: алгоритм, визуализация, моделирование, атомный каркас, углеродные наноструктуры

Keywords: algorithm, visualization, modeling, atomic framework, carbon nanostructures

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



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

Нанотрубка — протяженная структура диаметром от одного до нескольких десятков нанометров. Одним из наиболее распространенных видов нанотрубок являются углеродные нанотрубки.

Углеродные нанотрубки (УНТ) – это гексагональные графитовые сетки, свернутые в цилиндрические поверхности (без швов).

Взаимная ориентация гексагональной сетки графита и продольной оси нанотрубки определяет важную структурную характеристику – хиральность.

Хиральность нанотрубок обозначается набором символов (n, m) , указывающих координаты шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости должен совпадать с шестиугольником, находящимся в начале координат. По значению (n, m) различают прямые (ахиральные) нанотрубки $(n, 0)$ и (n, n) , в которых углеродные шестиугольники ориентированы параллельно и перпендикулярно оси цилиндра, соответственно. По внешнему виду поперечного среза, нанотрубки $(n, 0)$ называют нанотрубками типа «зигзаг» или зигзагообразные (рис. 1 а), а нанотрубки (n, n) нанотрубками типа «кресло» или «зубчатые» (рис. 1 б).

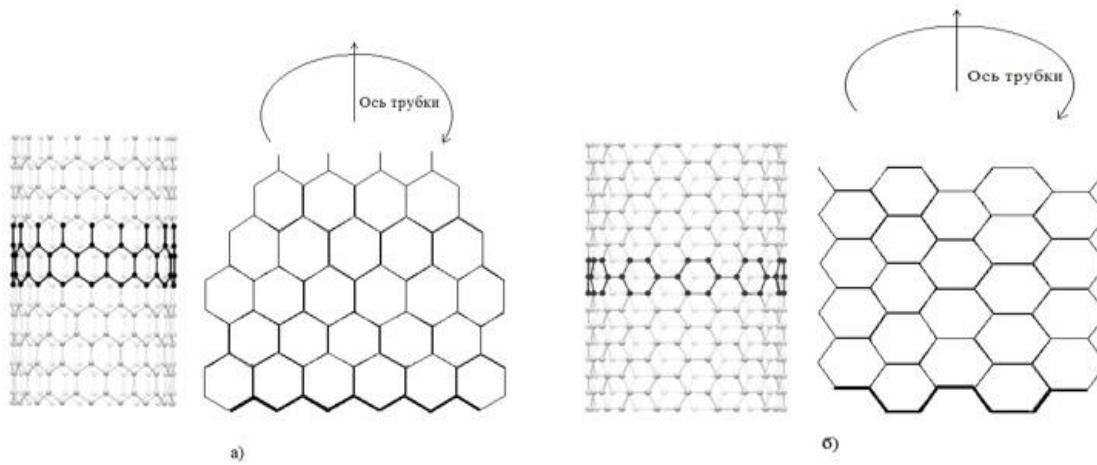


Рис. 1. Типы структуры углеродных нанотрубок
а) типа «зигзаг», б) типа «кресло»

Основными геометрическими характеристиками однослойной углеродной нанотрубки (ОУНТ) являются ее диаметр и длина. Для представления пространственного расположения атомов в нанотрубке, зададим углеродную нанотрубку как набор идентичных колец, на которых находятся атомы углерода (рис. 2 а).

При нахождении внешнего D и внутреннего d диаметров (рис. 2 б) кольца, воспользуемся формулами:

$$D = 2 \cdot (R_{cp.} + r_{эл.}),$$
$$d = 2 \cdot (R_{cp.} - r_{эл.}), \quad (1)$$

де $r_{эл.}$ – ковалентный радиус электрона, принимающий табличное значение, $r_{эл.}=0,062$ нм; $R_{cp.}$ – средний радиус цилиндра нанотрубки.



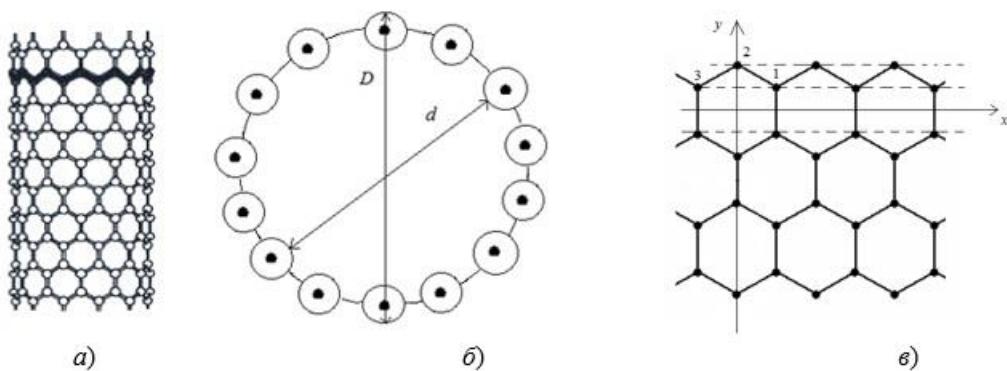


Рис. 2 Схема расчета атомного каркаса углеродной нанотрубки типа «зигзаг»

На рисунке 2 в изображен расчет атомного каркаса углеродной нанотрубки типа «зигзаг». Координаты вершин 1, 2, 3 шестиугольника будут рассчитываться по следующим формулам:

$$x_i = R_{cp} \cdot \cos \frac{2\pi}{n_i}, \quad (2)$$
$$y_i = R_{cp} \cdot \sin \frac{2\pi}{n_i},$$

где $n_i = 1, 2, \dots, n_{общ.}$

Предлагаемый алгоритм даёт возможность смоделировать геометрическую структуру ахиральной нанотрубки произвольной конфигурации, а разрабатываемый программный продукт может оказаться полезным для разработчиков углеродных материалов.

Научная новизна основных результатов работы состоит в следующем:

Разработаны модели и алгоритмы расчета ахиральных углеродных нанотрубок, позволяющие с единых позиций визуализировать данные структуры, с целью прогнозирования свойствnanoструктур.

Практическая значимость полученных результатов заключается в том, что предлагаемые математические модели, вычислительные алгоритмы и разработанное программное средство позволяют исследовать строение и свойства ахиральных углеродных нанотрубок с известным геометрическим законом строения атомной решетки, предусмотрена возможность генерации координат на основании такого закона.

Список литературы:

1. Готлиб И.Б. Молекулярно-динамическое моделирование nanoструктур 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 nanoструктур // Изв. РАН. МТТ. - 2010. - № 4. - С. 121-137.

Информация о себе: Ерёмина В.В. Email: banysheva@mail.ru, контакты: 89098189936

