

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ РОСТА УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ

Гребёнкин М. Ф., Кокорев И. И., Лобова Л. П.¹.

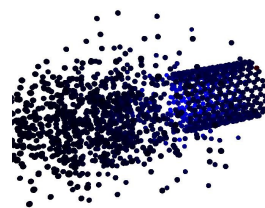
Международный университет природы, общества и человека «Дубна», филиал «Дмитров», каф. Математики и прикладной информатики
Россия, 141800, Московская область, г. Дмитров, ул. Махалина, 15
Тел.: (496)-223-48-89, факс (496)-223-48-89 E-mail: grebyonka@rambler.ru

¹МОУ Дмитровская средняя общеобразовательная школа №1 имени В. И. Кузнецова
Россия, 141800, Московская область, г. Дмитров, ул. Школьная, 11
Тел.: (495)-993-97-92, факс (495)-993-97-92 E-mail: ladalobova@gmail.com

Для успешной работы в области нанотехнологий надо готовить специалистов уже сейчас [1]. Сложность приборов и оборудования, применяемых в нанотехнологиях, затрудняют пропаганду нанотехнологических идей в школах и вузах. Моделирование некоторых нанопроцессов позволяет продвигаться в этом направлении. Мы уже представляли простую компьютерную программу, моделирующую построение графена [2].

В настоящей работе мы предлагаем тоже довольно простую компьютерную модель построения другой известной наноструктуры – углеродной нанотрубки [3]. За отправную точку была взята идея производства нанотрубок в реакторе при определённых условиях в потоке инертного переносчика атомов углерода. В качестве затравки использовались специально синтезированные молекулы, представляющие собой замкнутый «поясок» из нескольких бензольных колец, соединённых друг с другом. Например, можно представить себе молекулу пентацена, которую свернули в кольцо (на самом деле колец должно быть не пять, а больше). Это колечко-«поясок» определяет диаметр будущей нанотрубки. При определённых условиях атомы углерода один за другим присоединяются к затравочному кольцу, и нанотрубка начинает расти.

Компьютерное моделирование осуществлялось на языке Microsoft Visual C# с использованием Microsoft DirectX. На рисунке представлен скриншот работающей программы. Представленная компьютерная программа моделирует в пространстве реальный процесс роста углеродной нанотрубки. Она была с успехом использована на уроках в школе и на занятиях в вузе, где рассказывалось о нанотехнологиях.



Литература.

1. Гребёнкин М. Ф., Лобова Л. П. Нанотехнологии и школьное образование // *Прикладная информатика*, №2(14), 2008, стр. 17-23.
2. Лобова Л. П., Гребёнкин М. Ф., Рыбкин М. А. Моделирование графена // *XVI Конференция серии «Математика. Компьютер. Образование»*, г. Пущино, 19-24 января 2009 г. Тезисы, стр. 526.
3. http://www.nanometer.ru/2009/10/18/nanotubes_157642.html,