

К.И.Жалдыбин (6 курс, каф. ФМиКТМ), А.И.Мелькер, д.ф.-м.н., проф.

ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Исследование механических свойств нанотрубок и фуллеренов является актуальной задачей современной физики. Разработанная на кафедре молекулярно-динамическая модель «зарядов на связях» позволяет изучать формирование и механические свойства широкого спектра углеродных нанокластеров.

В больших молекулах фуллеренов наблюдаются различного рода дефекты. Для изучения природы этих дефектов было произведено исследование конформационных переходов в малых углеродных кластерах на примере бензола и циклогексана. Было обнаружено, что у данных молекул существует, кроме двух известных, и третья конформация – в форме пропеллера.

Целью данной работы было написание модуля, позволяющего графически представлять результаты различных молекулярно-динамических экспериментов.

Программное обеспечение было реализовано на VC++ с использованием функций библиотеки отображения 3D-графики OpenGL, что обеспечивает его полную совместимость с платформами Windows 9x/Me, Windows 2k/XP. Его отличительные особенности:

1. удобный графический интерфейс;
2. совместимость с уже существующим пакетом для проведения молекулярно-динамического расчета;
3. наглядность представления результатов молекулярно-динамического расчета, позволяющего визуально определять изменения конфигурации атомов в составе нанокластера, что является необходимым для изучения деформированной структуры;
4. автоматизированная генерация отчетов о молекулярно-динамическом эксперименте.

Таким образом, результатом работы стало завершение цепочки от результатов молекулярно-динамического эксперимента до наглядного анализа полученных результатов.