

УДК 620.5:57:04
ББК 30.3:28.0:32.97

Вознесенский Э. Ф.

Компьютерная визуализация нанообъектов : учебное пособие /
Э. Ф. Вознесенский, И. В. Красина; М-во образ. и науки России, Казан.
нац. исслед. технол. ун-т. – Казань : Изд-во КНИТУ, 2016. – 84 с.
ISBN 978-5-7882-2003-1

Рассмотрены возможности компьютерной визуализации нано-
объектов при использовании открытых библиотек моделей нанострук-
тур и бесплатного программного обеспечения, а также визуализация
углеродных наноструктур в среде программирования Matlab/Octave.

Предназначено для студентов-магистрантов всех форм обучения
по направлению 28.04.02 «Наноинженерия» (программа подготовки
«Наноструктурированные натуральные и искусственные материалы»)

Подготовлено на кафедре плазмохимических и нанотехнологий
высокомолекулярных материалов.

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Казанского национального исследовательского технологического уни-
верситета

Рецензенты: канд. техн. наук, доцент *А. Ф. Гайсин*
канд. техн. наук, доцент *А. Ю. Шемахин*

ISBN 978-5-7882-2003-1 © Вознесенский Э. Ф., Красина И. В., 2016
© Казанский национальный исследовательский
технологический университет, 2016

Содержание

Введение	3
1 Роль компьютерного моделирования в научном знании	4
2 Общие сведения о наночастицах и наносистемах	6
3 Компьютерное моделирование как новый инструмент вычислительной биологии	11
4 Биологические молекулы как объект моделирования	20
5 Программа VMD	45
6 Научная визуализация углеродных наноструктур	48
7 Программный пакет Matlab	51
8 Программный пакет Octave	56
Лабораторная работа № 1. Практика работы с архивом протеиновых структур WWPDB	57
Лабораторная работа № 2. Практика работы с .pdr-моделями углеродных нанообъектов	60
Лабораторная работа № 3. Визуализация структуры фрагмента графенового слоя средствами программной среды Matlab/Octave	61
Лабораторная работа № 4. Визуализация структуры фрагмента углеродной нанопленки средствами программной среды Matlab/Octave	65
Лабораторная работа № 5. Визуализация структуры фрагмента углеродной нанотрубки типа «zigzag» средствами программной среды Matlab/Octave	67
Лабораторная работа № 6. Визуализация структуры фрагмента углеродной нанотрубки типа «armchair» средствами программной среды Matlab/Octave	70
Лабораторная работа № 7. Визуализация структуры фрагмента спиральной углеродной нанотрубки типа «zigzag» средствами программной среды Matlab/Octave	74
Лабораторная работа № 8. Визуализация атомного скелета фрагмента фуллерена C ₆₀ средствами программной среды Matlab/Octave	77
Библиографический список	82