

**МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОСКИХ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР  
ОТ БЕНЗОЛА ДО ГРАФЕНА В ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ЦЕЛЯХ****Гребёнкин Михаил Фёдорович<sup>1</sup>, Лобова Лада Павловна<sup>2</sup>,  
Рыбкин Максим Андреевич<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Доктор технических наук, профессор Международного Университета природы, общества и человека «Дубна»;  
ГОУ ВПО Международный Университет природы, общества и человека «Дубна»,  
Филиал «Дмитров»;  
141800, Московская обл., г. Дмитров, ул. Махалина, 15;  
e-mail: grebyonka@rambler.ru.

<sup>2</sup>Учитель физики;  
МОУ Дмитровская средняя общеобразовательная школа №1 им. В.И.Кузнецова;  
141800, Московская обл., г. Дмитров, ул. Школьная, 11;  
e-mail: ladalobova@gmail.com.

<sup>3</sup>Студент 5-го курса;  
ГОУ ВПО Международный Университет природы, общества и человека «Дубна»,  
Институт системного анализа и управления;  
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19;  
e-mail: s-p-i-k-e2@mail.ru.

Молекула – важнейший физический объект. Необходимо иметь хоть какой-то визуальный образ интересующих нас молекул с тем, чтобы он в той или иной степени отражал свойства самой молекулы и вещества, состоящего из этих молекул. Между тем, непосредственно увидеть молекулы невозможно из-за их чрезвычайно маленьких размеров – размер молекул лежит в нанодиапазоне. В настоящее время удаётся «разглядеть» молекулы и даже атомы с помощью, например, электронного микроскопа, но структура молекулы в электронный микроскоп едва различима и понятна только специалистам. Поэтому так важно, в особенности для образовательных целей, правильно смоделировать молекулу с тем, чтобы наглядно представить её структуру, на основании которой можно было бы уже комментировать её свойства и характер взаимодействия с другими молекулами. К данной задаче вплотную примыкает задача моделирования объектов, которые относятся к т. н. нанотехнологиям.

Статья посвящается созданию компьютерной программы, позволяющей моделировать плоские углеродные структуры.

**Ключевые слова:** молекулярное моделирование, образование, мультимедийность.

**MOLECULAR MODELING OF FLAT CARBON STRUCTURES FROM BENZOL TO  
GRAPHEN IN EDUCATIONAL PURPOSES****Grebyonkin Mikhail<sup>1</sup>, Lobova Lada<sup>2</sup>, Rybkin Maksim<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Doctor of Science in Engineering, Professor;  
Dubna International University of Nature, Society, and Man,  
Branch «Dmitrov»;  
141800, Dmitrov, Moscow reg., Makhalina str., 19;  
e-mail: grebyonka@rambler.ru.

<sup>2</sup>Teacher of physics;  
Dmitrov School №1 named after V.I. Kuznetsov;  
141800, Dmitrov, Moscow reg., Shkolnaya str., 11;  
e-mail: ladalobova@gmail.com.

<sup>3</sup> Graduate student;

Dubna International University of Nature, Society, and Man,  
Institute of system analysis and management;  
141980, Dubna, Moscow reg., Universitetskaya str., 19;  
e-mail: s-p-i-k-e2@mail.ru.

*Molecule is the most important physical object. We must have at least some visual images of the molecules of interest to us, so that they more or less reflect the properties of the molecule itself and the substance consisting of these molecules. Meanwhile, we cannot see the molecule directly because of its extremely small size – the size of molecules is in the nanoscale. At the present time scientists can see molecules and even atoms with, for example, an electron microscope, but the structure of the molecule in the electron microscope is barely distinguishable and only the specialists can understand it. That is why it is so important, especially for educational purposes, to properly simulate the molecule to visualize its structure, under which they are able to comment on its properties and interaction with other molecules. This problem is closely connected with the problem of modeling the objects that belong to the so-called nanotechnology.*

*This article is concerned with the creation of a computer program that will simulate the flat carbon structures.*

**Keywords:** Molecule, computer program, education, nanotechnology.

Нанотехнологии – современная быстроразвивающаяся область техники, основанная на самых последних достижениях науки (High Tech). Объектами нанотехнологических разработок являются группы атомов и молекул, размеры которых обычно не превышают 100 нм. По тем же причинам, что и для молекул, моделирование таких объектов чрезвычайно важно для исследовательских и образовательных целей. Последнее обстоятельство следует выделить особо, так как образовательный процесс в области нанотехнологий только формируется, а его необходимость очевидна [1].

Молекулярное моделирование достаточно хорошо развито. Когда мы рисуем химические формулы и химические структуры на уроках химии в школе, мы уже имеем дело с плоскими моделями реальных веществ. Очень популярен молекулярный конструктор Лэнгмюра-Блоджетт [2], который даёт уже трёхмерный, а значит, и более наглядный и информативный образ молекулы. Конечно, в настоящее время наибольшие возможности для моделирования молекул предоставляют известные компьютерные программы, например, программа ChemichalOffice [3]. У этой программы очень большие возможности по моделированию самых различных молекул и она широко используется в работе научно-исследовательских и технологических лабораторий. Но для задач в области образования она (и ей подобные программы) мало пригодна из-за своей сложности, как в освоении, так и в эксплуатации и, что немаловажно, из-за высокой стоимости.

В работе со школьниками и со студентами, как нам кажется, важен не универсализм программы, а её «заточенность» на реализацию определённой образовательной идеи вместе с простотой в использовании и в приобретении.

Целью настоящей работы была выработка определённой образовательной идеи в области нанотехнологий и реализация этой идеи с помощью простой компьютерной программы, моделирующей определённые молекулы и нанобъекты.

Идея заключается в том, чтобы, начиная со сравнительно простых и хорошо известных молекул бензола, нафталина, антрацена и т. п., перейти с помощью определённого алгоритма к новому, очень популярному и перспективному нанобъекту – графену. Прежде всего, поскольку для построения указанных молекул используются только атомы углерода (с небольшой и не существенной в данном случае добавкой атомов водорода), можно очень убедительно продемонстрировать важность самой структуры молекулы для получения тех или иных свойств – берут атомы одного и того же элемента углерода, соединяют их в разных, но однотипных сочетаниях и получают разные молекулы, а значит разные вещества с различными физическими и химическими свойствами. Далее, данная идея позволяет, так сказать, «проиллюстрировать» на конкретном примере идеальную сущность<sup>1</sup> нанотехно-

---

<sup>1</sup> «Идеальность» этой сущности заключается в том, что сейчас абсолютное большинство нанобъектов получают по старинке, «сверху», деля крупный объект на более мелкие части или используя химические процессы, в которых отсутствует контроль за присоединением отдельных атомов. В идеале в нанотехнологиях предполагается использовать другой процесс, идти, так сказать, «снизу», от атома к молекуле и к более крупному нанобъекту. Пока такой процесс реализуется только в отдельных случаях в исследовательских лабораториях.

гий – возможность, осознанно манипулируя атомами, «построить» любой наперёд заданный объект, будь то конкретная сложная молекула (например, молекула сильного канцерогена бензпирена) или более физический нанообъект (например, графен). И, наконец, появляется возможность, опираясь на хорошо понятую в процессе моделирования атомную структуру графена, продемонстрировать его уникальные свойства, тем самым, привлекая внимание учащихся к современным материаловедческим проблемам и осуществляя, в какой-то степени, их профориентацию.

Реализовать данную образовательную идею предполагалось с помощью специальной компьютерной программы, которая позволяла бы выполнять следующие операции:

- выводить на экран изображение атома углерода с присоединёнными к нему атомами водорода (фактически – молекулу метана);
- с помощью определённой процедуры присоединять к исходному атому углерода другой атом углерода, имея в виду построение через несколько этапов молекулы бензола;
- демонстрировать по завершению предыдущего этапа плоскую структуру бензольного кольца и особенность валентных связей составляющих его атомов;
- осуществлять дальнейшее построение более сложных плоских молекулярных структур путём присоединения в соответствующие места новых атомов углерода, последовательно проходя через ряд молекул известных веществ из ряда: нафталин, антрацен, фенантрен, тетрацен, пирен и т. д.;
- демонстрировать в процессе построения однотипность получающихся структур, заключающуюся в том, что все эти молекулы составлены из атомов углерода (первый уровень однотипности) и все они составлены из соединённых вместе бензольных колец (второй уровень однотипности);
- осуществлять дальнейшее присоединение атомов углерода (и, соответственно, бензольных колец) с выходом на наноструктуру графена, число бензольных колец в которой велико или чрезвычайно велико;
- демонстрировать плоскую и двумерную структуру графена, первопричиной которой является плоская структура молекулы бензола;
- увеличивать и уменьшать масштаб конструируемой модели;
- вращать модель в трёх измерениях.

Следует сразу признать, что заявленная выше идея сборки молекулярных структур далека от реальности, но зато содержит познавательную логику однотипного построения всё более сложных объектов с возможностью одновременной оценки физических и химических свойств того, что получилось. Особенность данной процедуры заключается в том, что в процессе построения нет ограничения на число присоединённых атомов и, соответственно, бензольных колец, что позволяет продемонстрировать весьма нетривиальный ряд веществ с логическим выходом на графен.

Задуманная программа была реализована. При этом использовались следующие программные средства: среда программирования Delphi и графическая библиотека OpenGL.

На представленных скриншотах (рис. 1–5) продемонстрирована последовательная процедура сборки молекулы бензола, других веществ, состоящих из разного количества бензольных колец, например, коронена и, наконец, самого графена. Плоская и двумерная структура графена отчётливо видна на представленной модели.

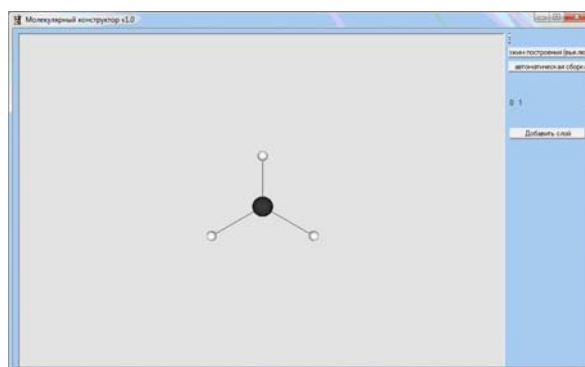


Рис. 1. Начальный этап работы с программой. Атом метана

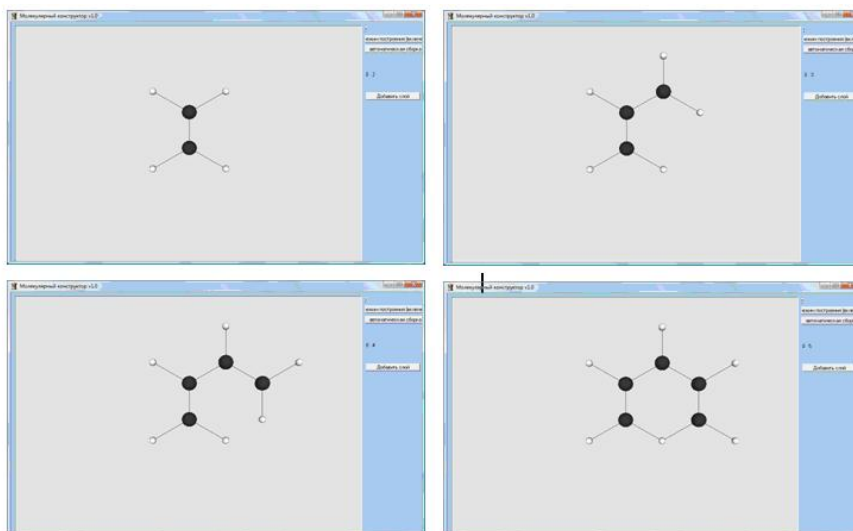


Рис. 2. Этапы построения молекулы бензола

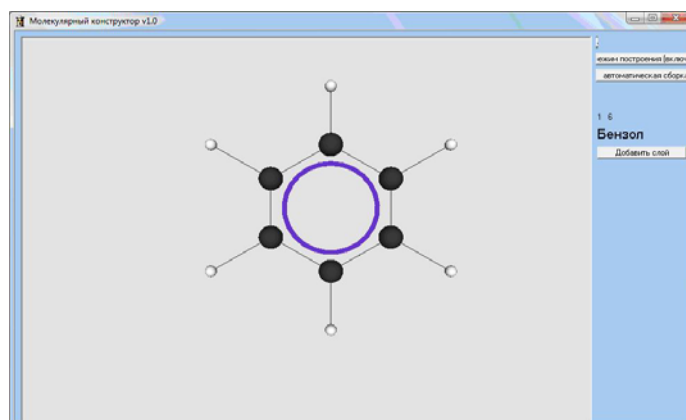


Рис. 3. Построенная модель – молекула бензола. Синее кольцо означает цепь сопряжения

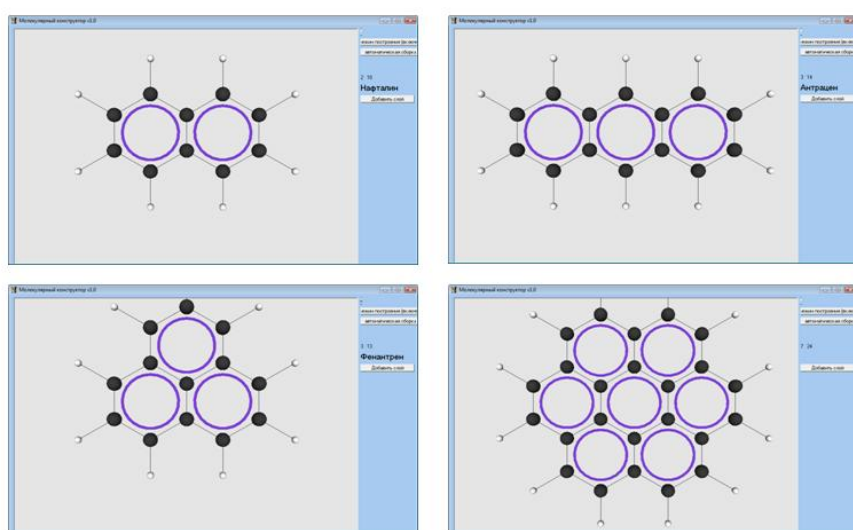


Рис. 4. Построенные модели молекул нафталина, антрацена, фенантрена и коронена

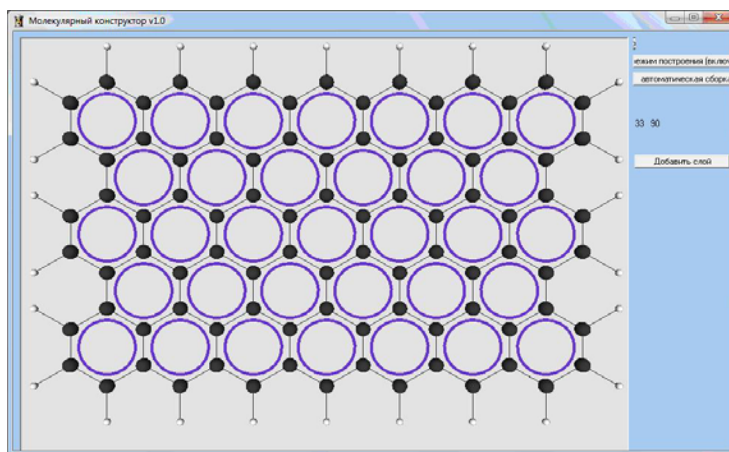


Рис. 5. Модель графена

Интересно заметить, что такой хорошо известный углеродный материал, как графит, можно представить как множество сложенных вместе листов графена, что программа позволяет промоделировать (см. рис. 6). Кстати, сейчас одним из самых доступных способов получения листов графена является его «отшелушивание» слой за слоем с поверхности графита.

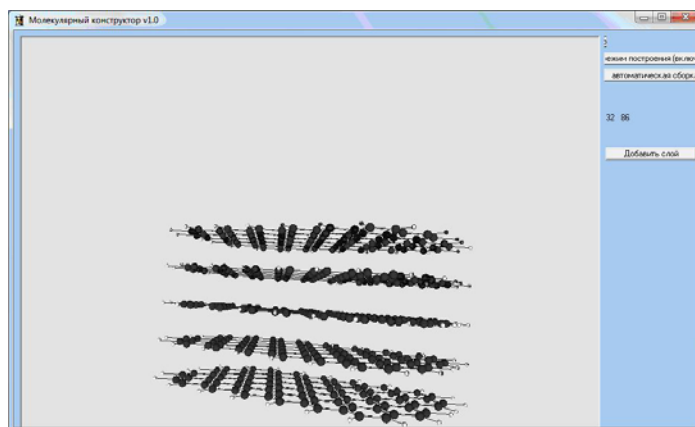


Рис. 6. Модель графита, полученная мультиплицированием слоёв графена

Возможности программы по поворотам модели молекулы и изменения её масштаба продемонстрированы на рис. 7.

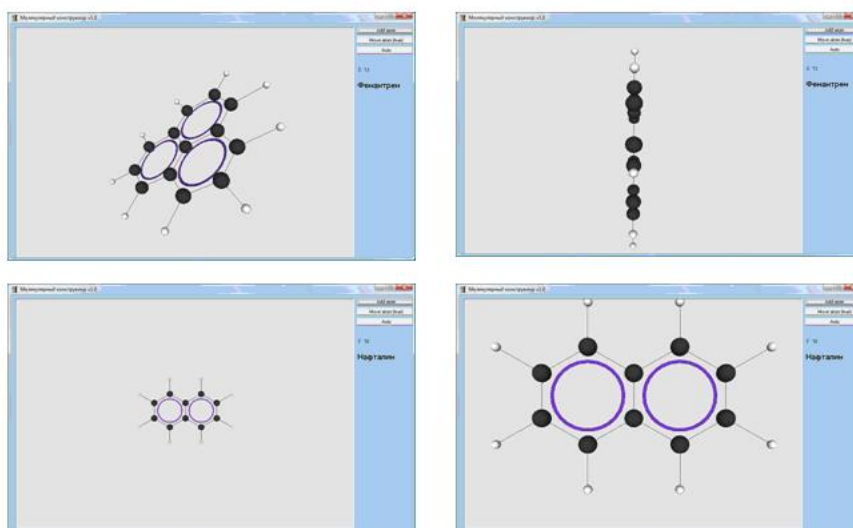
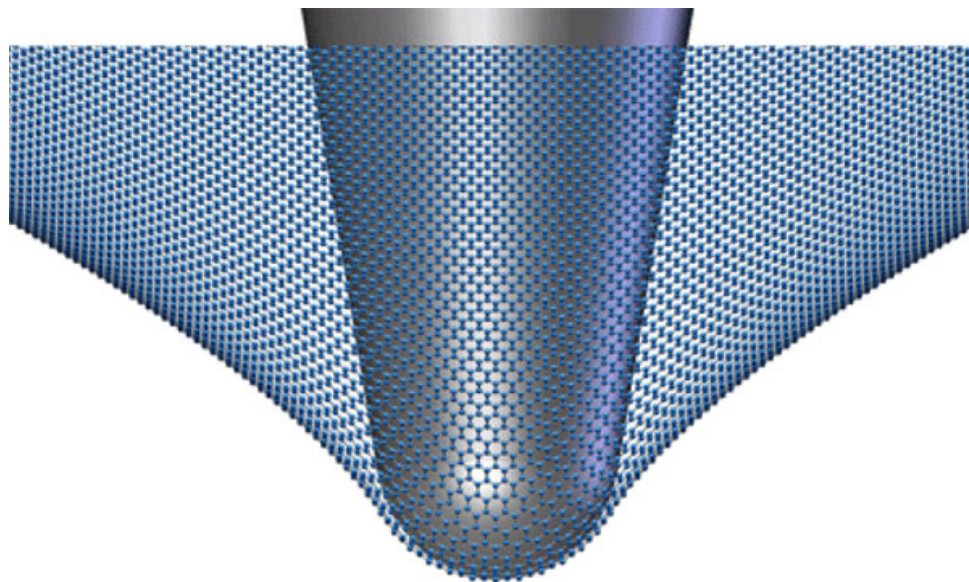


Рис. 7. Демонстрация возможностей программы по работе с моделью молекулы: повороты, масштабирование

Некоторые физические и химические свойства веществ, молекулы которых моделируются в данной работе, приведены в Приложении. Свойства же графена требуют хотя бы краткого комментария. Графен, как наноматериал, известен не более пяти лет, и его исследованию посвящено огромное число публикаций, см., например, [4]. Прежде всего, это связано с уникальностью его структуры: как это видно из предложенной в данной работе модели, графен – *двумерная* структура с толщиной слоя в *один атом*, рис. 5. Необычная структура графена приводит и к необычным физическим свойствам. Графен обладает уникальными прочностными свойствами, что связано с особенностями его структуры и её бездефектностью [5]. На рис. 8. показана схема реального испытания графена на прочность с помощью атомно-силового микроскопа.



*Рис. 8. Схема опыта по проверке листа графена на прочность [5]*

Его двумерность обеспечивает суперанизотропию его теплопроводности и электропроводности, причём теплопроводность [8] и электропроводность графена вдоль слоя очень хорошие. Подвижность носителей электрического заряда в графене удивительно высокая для органического материала, что открывает перспективы его применения в полупроводниковой технике. Это связано ещё и с тем, что, будучи хорошим двумерным проводником, графен, расположенный на специально подготовленной подложке из кремния, показывает уже полупроводниковые свойства. Более того, уже имеются опытные образцы транзисторов на графене, характерный размер которых меньше 30 нм [7], а рабочие частоты превышают 26 гигагерц [9].

И, наконец, появились сообщения о сверхпроводимости графена [10]. Чем не уникальный материал! Конечно, существуют технологические проблемы получения графеновых образцов заданных размеров<sup>2</sup> и в нужных количествах, но над этими проблемами работают большие исследовательские коллективы.

Предложенная в данной работе компьютерная программа апробировалась на дополнительных занятиях по курсу «Введение в нанотехнологии» в школе №1 г. Дмитрова. Школьники легко освоили работу с этой программой и, используя её, сделали доклад по молекулярному моделированию рассмотренных здесь структур на районной школьной конференции.

---

<sup>2</sup> Например, научились резать вдоль и распластывать углеродные нанотрубки для получения пластин графена малых размеров [11]. Правда, проблема получения самих нанотрубок до сих пор не имеет удовлетворительного технологического решения.



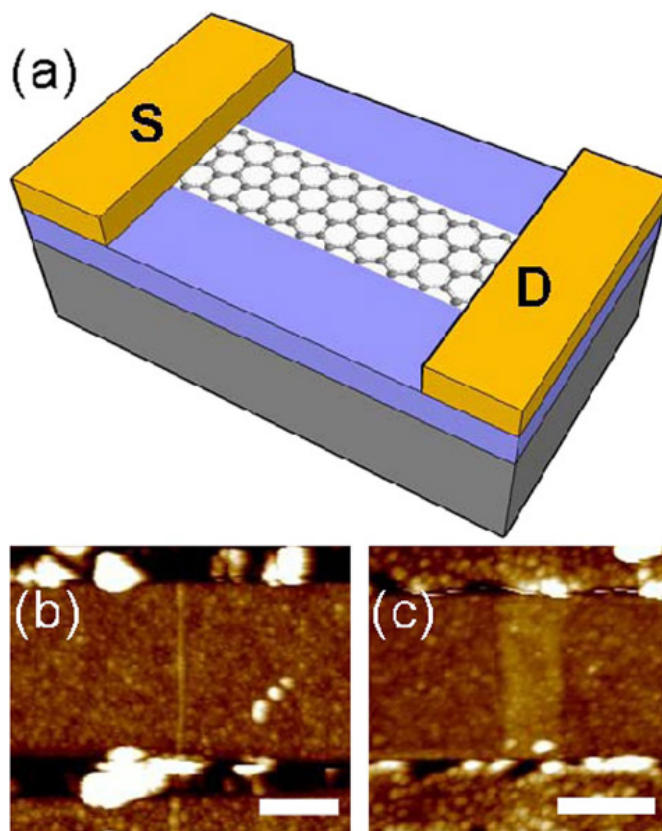


Рис. 9. Схема конструкции транзистора на полоске графена и изображение такого транзистора в электронном микроскопе [6]

Таким образом, создана виртуальная среда для последовательной сборки моделей плоских углеродных молекулярных структур, содержащих бензольные кольца, начиная от бензола (одно бензольное кольцо) и кончая графеном (очень большое число бензольных колец). Среда предназначена для использования в учебном процессе (на уроках физики и химии в школе) для сравнительного анализа веществ, молекулы которых содержат разное количество бензольных колец, с выходом на новую и очень перспективную наноструктуру – графен.

Авторы благодарят Ширкова П. Д. за полезные обсуждения.

## Список литературы

1. Гребёнкин М. Ф., Лобова Л. П. Нанотехнологии и школьное образование // Прикладная информатика. – 2008. – №2.
2. Лобова Л. П. Нанотехнологии и школьное образование // Физика в школе. – 2009. – №3.
3. Разработчик ChemOffice – офисного пакета для химиков. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.cambridgesoft.com/> (дата обращения: 25.11.2009).
4. Смирнов Е. А. И вновь о графене и нанотрубках // Публикации нанотехнологического сообщества «Нанометр»: web-сайт нанотехнологического сообщества «Нанометр». – [Электронный ресурс]. URL: [http://www.nanometer.ru/2009/05/02/grafen\\_155067.html](http://www.nanometer.ru/2009/05/02/grafen_155067.html) (дата обращения: 25.11.2009).
5. Ерин Ю. Графен оказался прочнее всех // [Электронный ресурс]. URL: <http://elementy.ru/news/430782> (дата обращения: 25.11.2009).
6. Уточникова В.В. Сколько слоёв графена нужно для полевого транзистора? // Публикации нанотехнологического сообщества «Нанометр»: web-сайт нанотехнологического сообщества «Нанометр». [Электронный ресурс]. URL: [http://www.nanometer.ru/2009/08/20/grafen\\_156422.html](http://www.nanometer.ru/2009/08/20/grafen_156422.html) (дата обращения: 05.12.2009).

7. Графеновые транзисторы // Публикации ежедневного научно-популярного интернет-журнала InFuture.ru: web-сайт ежедневного научно-популярного интернет-журнала InFuture.ru. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.infuture.ru/article/286> (дата обращения: 05.12.2009).
8. Уточникова В.В. Прорыва ждите через год // Публикации нанотехнологического сообщества «Нанометр»: web-сайт нанотехнологического сообщества «Нанометр». [Электронный ресурс]. URL: [http://www.nanometer.ru/2009/10/27/12566498911870\\_157791.html](http://www.nanometer.ru/2009/10/27/12566498911870_157791.html) (дата обращения: 05.12.2009).
9. Смирнов Е.А. Высокоскоростная память на основе УНТ и high-k материалов // Публикации нанотехнологического сообщества «Нанометр»: web-сайт нанотехнологического сообщества «Нанометр». [Электронный ресурс]. URL: [http://www.nanometer.ru/2009/02/22/fet\\_61519.html](http://www.nanometer.ru/2009/02/22/fet_61519.html) (дата обращения: 05.12.2009).
10. Трусов Л.А. Теория относительности и сверхпроводимость встретились в графене // Публикации нанотехнологического сообщества «Нанометр»: web-сайт нанотехнологического сообщества «Нанометр». [Электронный ресурс]. URL: <http://www.nanometer.ru/2007/03/20/grafen.html> (дата обращения: 05.12.2009).
11. Смирнов Е.А. Расстегнем нанотрубку // Публикации нанотехнологического сообщества «Нанометр»: web-сайт нанотехнологического сообщества «Нанометр». [Электронный ресурс]. URL: [http://www.nanometer.ru/2009/04/28/grafen\\_154912.html](http://www.nanometer.ru/2009/04/28/grafen_154912.html) (дата обращения: 05.12.2009).



## Приложение

## Свойства некоторых производных бензола

<p>Бензол <math>C_6H_6</math></p> 	<p>Бензол – органическое химическое соединение, бесцветная жидкость с приятным сладковатым запахом. Ароматический углеводород. Бензол входит в состав бензина, широко применяется в промышленности, является исходным сырьём для производства лекарств, различных пластмасс, синтетической резины, красителей. Хотя бензол входит в состав сырой нефти, в промышленных масштабах он синтезируется из других её компонентов. Токсичен, канцероген. Бензол – бесцветная жидкость со своеобразным резким запахом. Температура плавления – <math>5,5\text{ }^\circ\text{C}</math>, температура кипения – <math>80,1\text{ }^\circ\text{C}</math>, плотность – <math>0,79\text{ г/см}^3</math>, молекулярная масса – <math>78,11\text{ г/моль}</math>. Подобно всем углеводородам бензол горит и образует много копоти. С воздухом образует взрывоопасные смеси, хорошо смешивается с эфирами, бензином и другими органическими растворителями, с водой образует смесь с температурой кипения <math>69,25\text{ }^\circ\text{C}</math>. Растворимость в воде <math>1,79\text{ г/л}</math> (при <math>25\text{ }^\circ\text{C}</math>).</p>
<p>Нафталин <math>C_{10}H_8</math></p> 	<p>Нафталин по химическим свойствам сходен с бензолом: легко нитруется, сульфuriруется, взаимодействует с галогенами. Отличается от бензола тем, что ещё легче вступает в реакции. Плотность <math>1,14\text{ г/см}^3</math>, температура плавления <math>80,6\text{ }^\circ\text{C}</math>, температура кипения <math>218\text{ }^\circ\text{C}</math>, растворимость в воде примерно <math>30\text{ мг/л}</math>, температура вспышки <math>79 - 87\text{ }^\circ\text{C}</math>, температура самовоспламенения <math>525\text{ }^\circ\text{C}</math>, молярная масса <math>128,17052\text{ г/моль}</math>.</p>
<p>Антрацен <math>C_{14}H_{10}</math></p> 	<p>Антрацен – бесцветные кристаллы, <math>t_{пл}\text{ }216\text{ }^\circ\text{C}</math>, нерастворим в воде, при нагревании растворим в бензоле. Растворим в ацетонитриле и ацетоне. По химическим свойствам сходен с нафталином (легко нитруется, сульфuriруется и т.д.), но отличается от него тем, что легче вступает в реакции присоединения и окисления.</p>
<p>Фенантрен <math>C_{14}H_{10}</math></p> 	<p>Фенантрен – блестящие бесцветные кристаллы нерастворимые в воде, растворимые в органических растворителях, <math>t_{пл}\text{ }101\text{ }^\circ\text{C}</math>, <math>t_{кип}\text{ }340\text{ }^\circ\text{C}</math>. Растворы фенантрена обладают голубой флуоресценцией. Фенантрен содержится в каменноугольной смоле. Фенантрен используется в производстве красителей.</p>
<p>Тетрацен <math>C_{18}H_{12}</math></p> 	<p>Тетрацен образует желто-оранжевые кристаллы с температурой плавления <math>357\text{ }^\circ\text{C}</math>. При пониженном давлении тетрацен возгоняется. Тетрацен может быть использован как органический полупроводник и фотопроводник. При освещении тонкой пленки этого вещества резко повышается его электропроводность.</p>
<p>Пирен <math>C_{16}H_{10}</math></p> 	<p>Пирен – бесцветные кристаллы; температура плавления <math>150\text{ }^\circ\text{C}</math>, температура кипения <math>399\text{ }^\circ\text{C}</math>. Растворим в этаноле, бензоле, не растворим в воде.</p>
<p>Бензпирен <math>C_{20}H_{12}</math></p> 	<p>Бензпирен – органическое химическое соединение, представитель семейства полициклических углеводородов. Образуется при сгорании углеводородного жидкого, твёрдого и газообразного топлива (в меньшей степени при сгорании газообразного). В окружающей среде накапливается преимущественно в почве, меньше в воде. Бензпирен является одним из наиболее опасных углеводородов. Высокие концентрации бензпирена наблюдаются на городских магистралях, а также вблизи заправочных станций.</p>