

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ: ОТ МОЛЕКУЛЫ БЕНЗОЛА ДО ФУЛЛЕРЕНА В ШКОЛЬНОМ КУРСЕ «ВВЕДЕНИЕ В НАНОТЕХНОЛОГИЮ»

Лобарева А.Э., руководитель Лобова Л. П.

МОУ Дмитровская 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

В школьном курсе «Введение в нанотехнологию» мы познакомились с целым рядом веществ. Первым в этом ряду был всем известный бензол, далее мы изучали вещества, состоящие из двух и более бензольных колец: нафталин, антрацен, фенантрен и т.д., пока не перешли к изучению графена и нанотрубки, состоящих из множества бензольных колец. А это уже наноматериалы. Эта работа посвящена изучению строения и свойств новейшего и интереснейшего наноматериала – фуллерена C_{60} .

Фуллерен C_{60} — это молекула, которая имеет форму идеального шара, что необычно для молекул. Благодаря своей форме он более устойчив. Полость внутри фуллерена тоже имеет форму шара, что намного упрощает расчеты объема вещества, которое можно поместить внутрь фуллерена.

В ходе работы была выдвинута и математически доказана гипотеза о том, что чем ближе двугранный угол к естественному валентному углу углерода, тем устойчивее молекула фуллерена.

В работе было проведено моделирование фуллерена для формирования представления о его строении, пространственной конфигурации атомов и бензольных колец. Ведь фуллерен – это объект наномира, не доступный непосредственному наблюдению.