

## Ученые предложили новый подход для эффективного моделирования наноматериалов



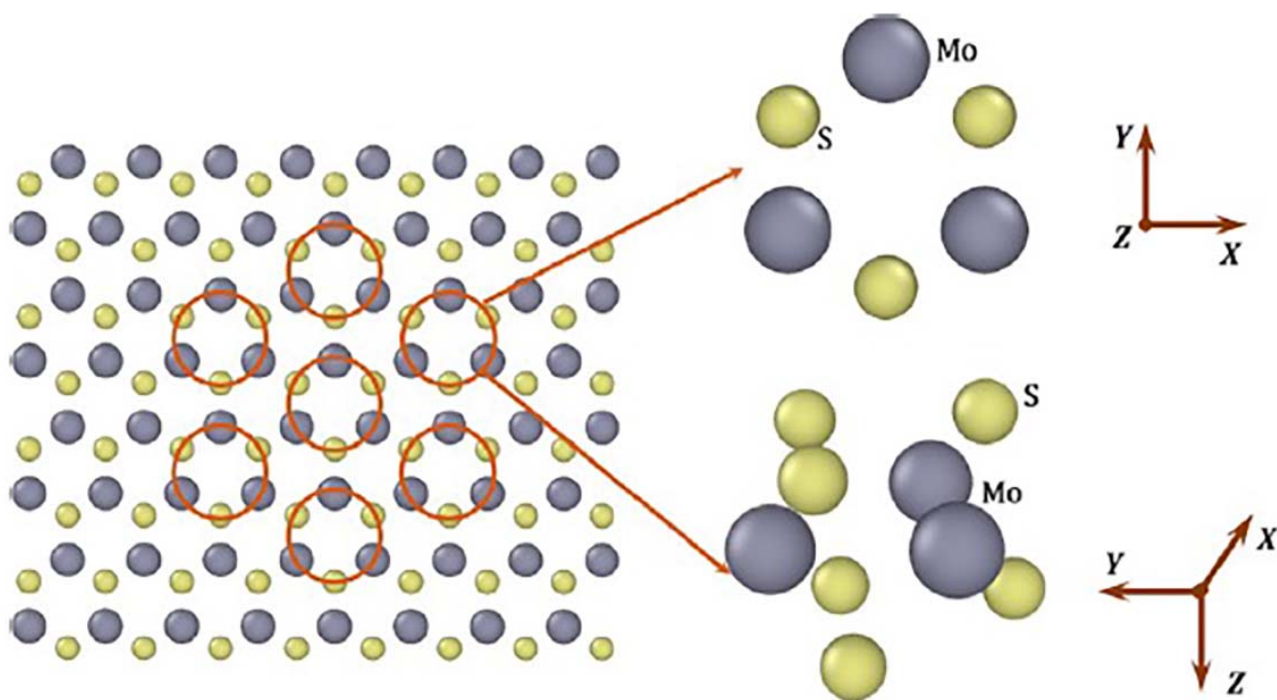
Ученые предложили новый подход для эффективного моделирования наноматериалов

Исследователи из Высшей школы теоретической механики [Института прикладной математики и механики](#) Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (СПбПУ) и Тель-Авивского университета предложили новый подход для повышения эффективности математического моделирования процессов в материалах на наноуровне, что важно для дальнейшего развития наноинженерии. Результаты исследования представлены в статье, [опубликованной в журнале первого квартала "Mechanics Research Communications"](#)



Для исследований ученые использовали однослойный дисульфид молибдена (SLMoS<sub>2</sub>) – это двухмерный материал с большим количеством перспективных применений, таких как миниатюрные датчики, наноустройства и др. Обычно при проектировании инженерных устройств используются методы вычислительной механики, однако на наноуровне они либо неприменимы, либо занимают слишком продолжительное время. Ученые предложили объединить атомы SLMoS<sub>2</sub> в жесткие «зерна».

*«Законы взаимодействия между “зернами” были подобраны таким образом, чтобы новая решетка из “зерен” обладала упругими свойствами, присущими исходной кристаллической решетке. Количество связей между зернами намного меньше, чем между атомами в пересчете на одну и ту же часть кристаллической решетки. Как следствие, расчеты с “зернами” выполняются намного быстрее, чем с атомами»,* –отмечают выпускники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого Игорь БЕРИНСКИЙ, старший лектор Тель-Авивского университета и Артём ПАНЧЕНКО, постдокторант в Тель-Авивском университете.



**Fig. 3.** Grains in MoS<sub>2</sub> lattice.

Екатерина ПОДОЛЬСКАЯ, доцент Высшей школы теоретической механики СПбПУ, добавляет: «Благодаря нашему методу расчеты стали проще, что дает возможность предсказать механическую реакцию материала на растяжение и изучить механизм его разрушения. Это важно для дальнейшего применения этого материала в нанотехнологии».

В следующей серии экспериментов научная группа планирует исследовать деформируемые зерна. Это позволит корректно рассматривать не только малые, но и большие деформации в материале. По мнению исследователей, предлагаемый подход может в дальнейшем использоваться для других законов взаимодействия атомов и для разных видов зерен.