

## Математики нашли новый способ моделирования процессов в наноматериалах

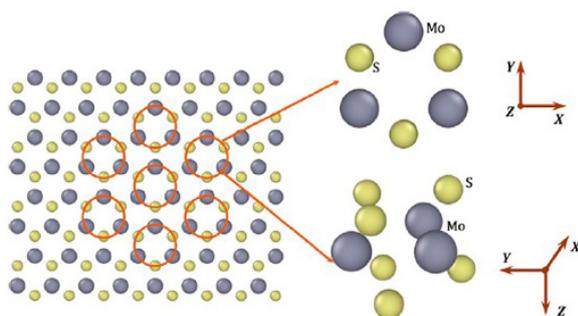
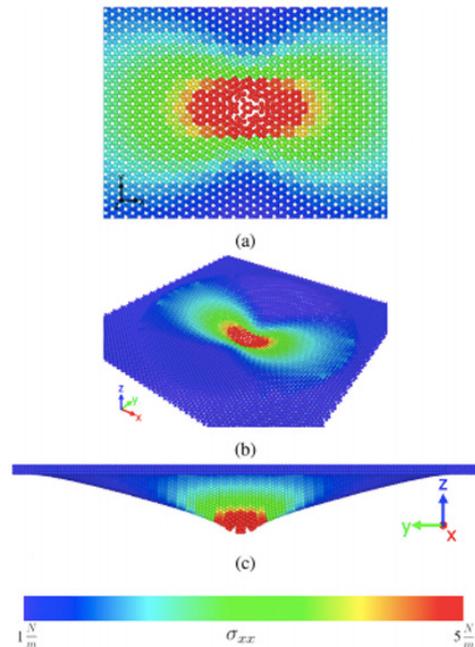


Fig. 3. Grains in MoS<sub>2</sub> lattice.



Исследователи из России и Израиля предложили новый подход для повышения эффективности математического моделирования процессов в материалах на наноуровне. Результаты исследования ██████████ в журнале *Mechanics Research Communications*.

Для исследований ученые использовали однослойный дисульфид молибдена — двумерный материал с большим количеством перспективных применений, например в миниатюрных датчиках и наноустройствах. Обычно при проектировании инженерных устройств используются методы вычислительной механики, но на наноуровне они либо неприменимы, либо занимают слишком продолжительное время. Ученые из Высшей школы теоретической механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого и Тель-Авивского университета предложили объединить атомы однослойного MoS<sub>2</sub> в жесткие «зерна».

«Новая решетка из "зерен" обладает 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 СПбПУ Игорь Беринский, старший лектор Тель-Авивского университета, и Артем Панченко, постдокторант в Тель-Авивском университете.

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 наноинженерии».

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.

██████████