

Ученые предложили новый подход для эффективного моделирования наноматериалов



Исследователи из Высшей школы теоретической 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, [REDACTED].

Для исследований ученые использовали однослойный дисульфид молибдена (SLMoS₂) – это двумерный 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 SLMoS₂ в жесткие «зерна».

«Законы взаимодействия между «зернами» были подобраны таким образом, чтобы новая решетка из «зерен» обладала упругими свойствами, присущими исходной кристаллической решетке. Количества 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.

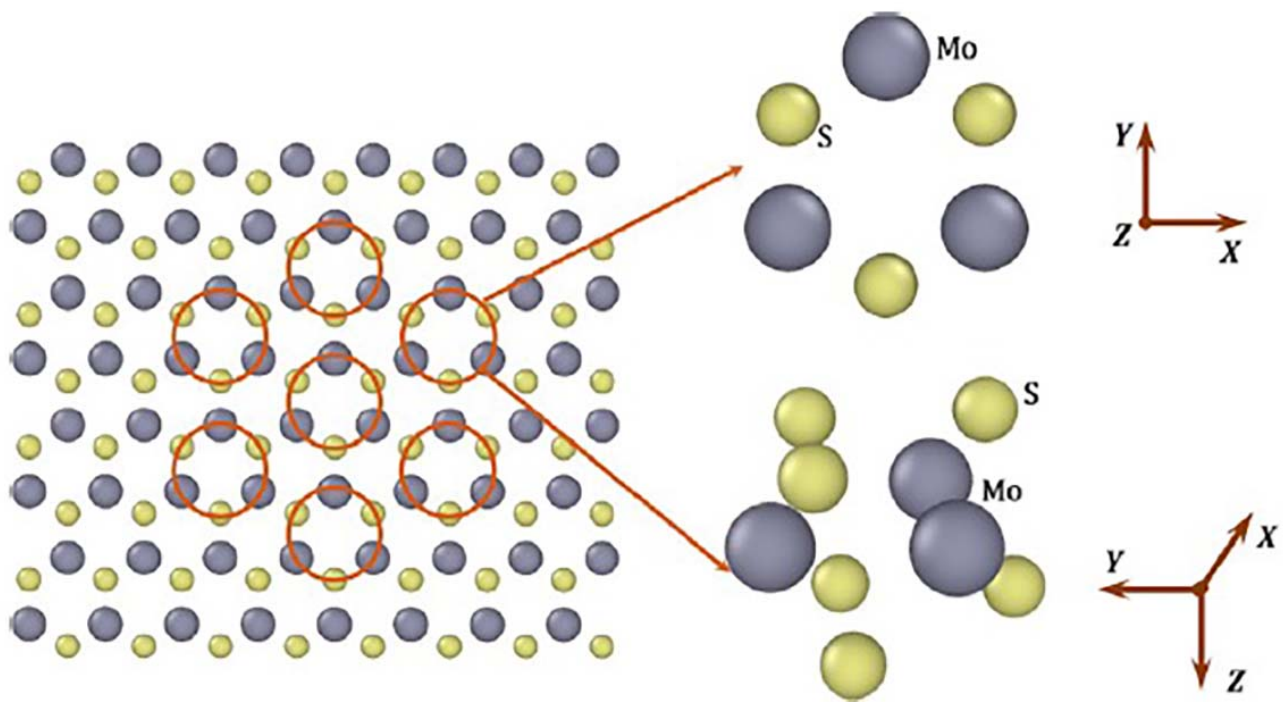


Fig. 3. Grains in MoS_2 lattice.

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.

Медицентр СПбПУ
Раиса Бестугина