

# СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В НАНОМАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

## MODERN METHODS OF MATHEMATICAL MODELING IN NANOMATERIALS SCIENCE

**D. Silantev**

**Summary.** The article presents an overview of modern mathematical modeling methods in the field of nanomaterials and quantum systems. Key approaches are examined, including the solution of the Schrödinger equation for electronic structure analysis, quantum chemistry methods (Hartree–Fock, OVGF), molecular dynamics with embedded-atom potentials (EAM), finite element modeling of nonstationary thermal processes, and stochastic methods for describing mechanical effects. Special attention is paid to modeling heterogeneous systems such as mesoporous materials, doped nanocrystals, and two-dimensional metal–silicon structures. It is shown that combining various methods allows for a balance between calculation accuracy and computational efficiency. The research results demonstrate the importance of mathematical modeling for predicting material properties and optimizing technological processes.

**Keywords:** Schrödinger equation, quantum chemical calculations, molecular dynamics, finite element method, nanomaterials, mesoporous structures, doped nanocrystals, density functional theory (DFT), electronic structure, phase transitions, stochastic modeling, thermal processes, mechanical properties, computational efficiency.

**Силантьев Данила Михайлович**

Аспирант, Московский государственный  
технологический университет «Станкин»  
silad.micher@mail.ru

**Аннотация.** В статье представлен обзор современных методов математического моделирования в области наноматериалов и квантовых систем. Рассмотрены ключевые подходы, включая решение уравнения Шрёдингера для анализа электронной структуры, методы квантовой химии (Хартри-Фок, OVGF), молекулярную динамику с потенциалами погружённого атома (EAM), конечно-элементное моделирование нестационарных тепловых процессов и стохастические методы для описания механических воздействий. Особое внимание уделено моделированию гетерогенных систем, таких как мезопористые материалы, легированные нанокристаллы и двумерные металл-кремниевые структуры. Показано, что комбинирование различных методов позволяет достичь баланса между точностью расчётов и вычислительной эффективностью. Результаты исследований демонстрируют важность математического моделирования для прогнозирования свойств материалов и оптимизации технологических процессов.

**Ключевые слова:** уравнение Шрёдингера, квантово-химические расчёты, молекулярная динамика, метод конечных элементов, наноматериалы, мезопористые структуры, легированные нанокристаллы, теория функционала плотности (DFT), электронная структура, фазовые переходы, стохастическое моделирование, тепловые процессы, механические свойства, вычислительная эффективность.

## Введение

Современные исследования в области наноматериалов и квантовых систем требуют комплексного применения математических методов для моделирования многоуровневых физических процессов. Фундаментальную роль играет уравнение Шрёдингера, позволяющее анализировать электронную структуру наноразмерных объектов. Для более сложных систем используются комбинированные подходы, включающие методы квантовой химии, молекулярной динамики и конечно-элементного моделирования.

Особое значение имеют специализированные методы расчета для гетерогенных систем, таких как мезопористые материалы и процессы механического воздействия на вещества. Эти подходы демонстрируют важность адаптации математического аппарата к специфике исследуемых явлений. Общей чертой современных исследований является поиск оптимального баланса между точностью расчетов и вычислительной эффективностью, что достигается за счет разумных упрощений и комбинирования различных методик.

Представленный обзор охватывает ключевые аспекты математического моделирования в материаловедении, подчеркивая взаимосвязь между теоретическими методами и их практическим применением для решения актуальных научных задач.

## Обзорная часть

В ряде исследований [8; 7; 3; 6] в моделировании используется уравнение Шрёдингера.

Уравнение Шрёдингера — фундаментальное уравнение квантовой механики, описывающее эволюцию волновой функции системы во времени. В своей наиболее общей форме оно записывается как:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \hat{H} \Psi(r, t),$$

где:  $\Psi(r, t)$  — волновая функция, характеризующая состояние системы,

$\hat{H}$  — гамильтониан (оператор полной энергии системы),

$\hbar$  — приведённая постоянная Планка,  
 $i$  — мнимая единица.

Для нерелятивистской частицы в потенциальном поле  $V(r,t)$  уравнение принимает вид:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r,t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r,t) \right) \Psi(r,t),$$

где  $m$  — масса частицы, а  $\nabla^2$  — оператор Лапласа.

Уравнение Шрёдингера лежит в основе квантовой динамики, позволяя предсказывать вероятностные распределения координат, импульсов и других наблюдаемых величин. В стационарном случае оно сводится к задаче на собственные значения, определяющей энергетический спектр системы.

Другая работа [4] посвящена исследованию электронных свойств нанокристаллов GaAs, легированных Zn, которое опирается на многоэлектронные методы квантовой химии, адаптированные для низкоразмерных систем. Основу методологии составило решение уравнения Шрёдингера в приближении самосогласованного поля, где волновая функция системы аппроксимируется антисимметризованными одноэлектронными орбиталями. Для учёта кулоновского и обменного взаимодействий между электронами применён метод Хартри-Фока, в котором потенциал каждого электрона вычисляется как усреднённое поле, создаваемое остальными частицами. Итерационная процедура самосогласования, реализованная в программе Gaussian, позволила минимизировать полную энергию системы путём последовательного уточнения электронных распределений. Использование базисных наборов 6-311g и ub3lур обеспечило компромисс между точностью расчётов и вычислительными ресурсами.

Анализ электронных свойств выполнен с помощью метода OVGF (outer valence Green function), основанного на теории функций Грина. Этот подход учитывает корреляции за пределами приближения Хартри-Фока через решение уравнения Дайсона-Швингера, связывающего невозмущённую и возмущённую функции Грина. Метод OVGF предоставил доступ к энергиям высшей занятой (HOMO) и низшей свободной (LUMO) молекулярных орбиталей, что критично для определения ширины запрещённой зоны. Расчёты показали, что даже для минимальных нанокристаллов (9 атомов) квантово-размерные эффекты доминируют, увеличивая запрещённую зону до 4.24 эВ.

Оптимизация геометрии нанокристаллов проводилась через минимизацию функционала полной энергии, где гамильтониан системы включал кинетические, потенциальные и обменные члены. Визуализация структур выявила, что увеличение концентрации Zn выше

20 % приводит к ослаблению связи примеси с решёткой, что согласуется с ростом энергии системы при нарушении равновесной конфигурации. Зависимость ширины запрещённой зоны от размера НК интерпретирована в рамках модели квантового ограничения, где уменьшение числа атомов усиливает локализацию электронов.

Нелинейный рост запрещённой зоны при высоком легировании Zn (до 5.56 эВ) объяснён переходом от точечных примесных центров к формированию кластеров, что потребовало перехода от одночастичных моделей к учёту коллективных эффектов. Теория возмущений использована для оценки вклада акцепторных уровней Zn в электронную структуру, где потенциал примеси модифицирует зонный спектр через гибридизацию атомных орбиталей.

В следующем случае [10] использовался метод «погруженного атома», в котором энергия одного атома в атомной структуре определяется выражением:

$$E_i = F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_j \phi_{ij},$$

$$\rho_i = \sum_j \rho_j,$$

где  $F$  — функция «погружения»;  $\rho_i$  — плотность электронов в  $i$ -м месте;  $\phi$  — энергия парного взаимодействия.

В работе проведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование сферических наночастиц серебра с гранецентрированной кубической решёткой, использующее различные EAM-потенциалы. Система термостатировалась ансамблем NVT (термостат Нозе-Гувера) с временным шагом 1 фс. На первом этапе выполнялось уравнивание при 300 К в течение 500 пс, затем нагрев до 1600 К со скоростью 2,6 К/пс для анализа структурных изменений. Температурные зависимости потенциальной энергии обработаны методом LOESS в программе Origin, что позволило сгладить данные и выявить закономерности фазовых переходов.

В следующей работе [9] основу исследования составило конечно-элементное моделирование нестационарного теплового поля, генерируемого высококонцентрированной плазменной струей. Математическая модель базировалась на решении нелинейного уравнения теплопроводности, учитывающего зависимость тепловых свойств материала от температуры. Для описания композиционной природы твердых сплавов (карбидная фаза + связка) введено понятие эквивалентной теплопроводности, рассчитываемой как средневзвешенное значение по объёмным долям компонентов.

Граничные условия включали конвективный теплообмен с окружающей средой и радиационные потери, что потребовало решения сопряженной задачи тепло-

переноса. Численная реализация выполнена в пакете MSC. Nastran с использованием восьмиузловых изопараметрических элементов. Дискретизация геометрии резца проводилась с адаптацией сетки к зоне режущей кромки, где локализовано тепловое воздействие.

Ключевой особенностью модели стало воспроизведение движения плазменного источника вдоль поверхности инструмента. Тепловая нагрузка задавалась распределенным потоком с гауссовым профилем плотности, перемещающимся с технологической скоростью. Анализ термического цикла включал расчет мгновенных скоростей нагрева и охлаждения, определяющих фазовые превращения в материале.

Валидация модели подтверждена сопоставлением расчетных температурных полей с экспериментальными данными. Установлено, что формирование нанокристаллической структуры (размер карбидов ~100 нм) происходит при достижении пиковых температур выше 1370°C и скоростях охлаждения, превышающих 10<sup>6</sup> °C/с. На основе модели оптимизированы режимы обработки: сила тока дуги 315–400 А, скорость перемещения плазмотрона 18–23 м/ч.

Другое исследование [1] посвящено процессу эксфолиации графита в стержневой мельнице. Авторы обнаружили, что между стержнями и барабаном образуется динамический зазор из частиц, уменьшающийся в ходе обработки. Предложен новый механизм расслоения: при прохождении через зазор частица разделяется на две — толщиной, равной зазору, и с остаточной толщиной.

Для моделирования использован подход на основе марковских процессов с дискретными фракциями частиц. Это существенно упростило расчеты по сравнению с непрерывными моделями. Численные эксперименты выявили оптимальные параметры: зазор около половины максимальной толщины частиц и использование мелкодисперсного исходного материала.

В следующей работе [2] рассматривается проблема моделирования напряженного состояния мезопористых структур на основе кремния (por-Si), насыщенных водой (H<sub>2</sub>O), вблизи точки фазового перехода вода–лед. Основное внимание уделяется влиянию кристаллизации воды в порах на механическую устойчивость материала, что особенно актуально для разработки электрохимических устройств, работающих в условиях низких температур. Авторы предлагают теоретическую модель, учитывающую структурные особенности por-Si, включая ориентацию пор и наличие естественного оксидного слоя (SiO<sub>2</sub>) на их поверхности.

Математическая модель основана на обобщенном сингулярном приближении (ОСП) теории случайных

полей, которое позволяет анализировать напряженно-деформированное состояние композита. Для описания механических свойств используются операторы концентрации напряжений  $K^o(r)$  и деформаций  $K^e(r)$ , связывающие локальные и усредненные значения тензоров напряжений и деформаций. Учет слоя SiO<sub>2</sub> требует двухэтапного подхода: сначала моделируется композит «лёд–SiO<sub>2</sub>», а затем его влияние интегрируется в общую структуру por-Si–H<sub>2</sub>O. Для численных расчетов применяется метод самосогласования, где эффективные модули упругости определяются итерационно, а геометрия пор аппроксимируется вытянутыми сфероидными.

Результаты моделирования демонстрируют, что рост объемной доли воды и увеличение безразмерного параметра  $h/r$  (отношение толщины оксидного слоя к радиусу поры) приводят к повышению напряжений в кремниевой матрице. Однако даже при максимальных значениях этих параметров напряжения (до 120 МПа) остаются ниже предела прочности кремния (700 МПа), что подтверждает устойчивость por-Si–H<sub>2</sub>O к многократным циклам заморозки-оттаивания. Важно отметить, что учет SiO<sub>2</sub> существенно корректирует прогнозируемые напряжения по сравнению с упрощенными моделями, где этот слой игнорируется.

В другой работе [5] исследуется атомная и электронная структура двумерных систем Li-Si и Be-Si, формирующихся на поверхности Si (100), при толщине металлического покрытия от одного до трёх монослоев (МС). Основу исследования составляют методы теории функционала плотности (DFT) и псевдопотенциалов, что позволяет детально проанализировать структурные и электронные свойства изучаемых систем. Авторы демонстрируют, что при одном МС формируются упорядоченные силицидные слои: атомы Li внедряются внутрь верхнего слоя Si, а атомы Be занимают позиции между двумя верхними слоями Si. При этом в электронной структуре наблюдается энергетическая щель вблизи уровня Ферми шириной 1,02 эВ для Li-Si и 0,36 эВ для Be-Si, что свидетельствует о полупроводниковом характере этих систем.

При увеличении толщины покрытия до двух и трёх МС происходит перестройка атомных конфигураций: атомы Li смещаются между слоями Si, а атомы Be поднимаются над поверхностью. Важно отметить, что упорядоченность структуры сохраняется только для Li при двух МС, тогда как для Be уже при двух МС наблюдается неупорядоченное расположение. При трёх МС система Li-Si образует сплошной неупорядоченный смачивающий слой, а Be-Si формирует цепочки без дальнего порядка. Электронная структура при этом претерпевает значительные изменения: энергетическая щель исчезает сначала для Li (при двух МС), а затем для Be (при трёх МС), что указывает на переход к металлическому поведению.

Математическая часть исследования базируется на численных расчётах в рамках метода Кона-Шэма с использованием приближения локальной электронной плотности (LDA). Для моделирования применялся пакет FHI96md, а псевдопотенциалы генерировались с помощью FHI98pp. Расчёты проводились с энергией обрезания 10 Ry и использованием пяти k-точек по схеме Монкхорста (331). Анализ плотности электронных состояний (ПЭС) выполнялся с гауссовым размытием уровней (полуширина 0,05 эВ), что обеспечило высокую точность определения энергетических щелей. Особый интерес представляет расчёт энергии адгезии, показавший, что связь между металлом и кремнием достаточно сильна для формирования силицидов, хотя и слабее, чем в случае переходных металлов, таких как Fe.

### Заключение

В представленных исследованиях продемонстрировано разнообразие математических подходов к моделированию сложных физических систем. Фундаментальную роль играет уравнение Шрёдингера, выступающее основой для квантово-химических расчётов электронной структуры наноматериалов. В работе [4] его решение в приближении Хартри-Фока с последующим применением метода OVGf позволило проанализировать квантово-размерные эффекты в легированных нанокристаллах, выявив нелинейную зависимость ширины запрещённой зоны от концентрации примесей.

Для моделирования динамики атомных систем активно используются методы молекулярной динамики с потенциалами погружённого атома [10]. Данный подход,

сочетающий учёт парных взаимодействий и электронной плотности, доказал свою эффективность при исследовании фазовых переходов в металлических наночастицах. В случае макроскопических тепловых процессов [9] применяется конечно-элементное моделирование, где особое внимание уделяется нелинейным эффектам и адаптивным сеткам для точного описания движущихся тепловых источников.

Отдельного внимания заслуживают работы по моделированию сложных гетерогенных систем. Исследование мезопористого кремния [2] демонстрирует важность учёта многослойной структуры пор через обобщённое сингулярное приближение, в то время как анализ эксфолиации графита [1] показывает преимущества стохастических методов перед детерминированными подходами при описании процессов измельчения. Работа [5] подчёркивает чувствительность электронных свойств двумерных систем к атомной структуре, что требует точного подбора параметров в DFT-расчётах.

Общей чертой всех исследований является необходимость компромисса между точностью моделирования и вычислительными затратами. Это достигается за счёт:

- 1) разумных упрощений исходных уравнений,
- 2) комбинирования различных методов,
- 3) оптимизации численных алгоритмов.

Полученные результаты подтверждают, что современное материаловедение требует глубокой интеграции теоретических методов с экспериментальными данными, где математическое моделирование выступает ключевым связующим звеном.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Альдавуд Саиф Сухаил Юсуф, Баранов Андрей Алексеевич, Першин Владимир Фёдорович. Математическая модель процесса эксфолиации графита в стержневой барабанной мельнице // Вестник ТГТУ. 2024. №1. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/matematiceskaya-model-protsesta-eksfoliatsii-grafita-v-sterzhnevoy-barabannoy-melnitse>.
2. Бардушкин Андрей Владимирович, Яковлев Виктор Борисович. Моделирование напряженного состояния структур por-Si — H<sub>2</sub>O в окрестности точки фазового перехода воды // Известия вузов. Электроника. 2025. №2. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/modelirovanie-napryazhennogo-sostoyaniya-struktur-por-si-h2o-v-okrestnosti-tochki-fazovogo-perehoda-vody>.
3. Галина Г.К., Муртазина Р.Д., Низамова А.Д., Садриева Р.Т., Сидельникова Н.А. Исследование решения одномерного стационарного уравнения Шрёдингера на бесконечности // Вестник Башкирск. ун-та. 2022. №2. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/issledovanie-resheniya-odnomernogo-statsionarnogo-uravneniya-shredingera-na-beskonechnosti>.
4. Жуков Николай Дмитриевич, Клецов Алексей Александрович, Мосияш Денис Сергеевич, Беляев Виктор Васильевич. Моделирование атомных конфигураций нанокристаллов на стадии зародышеобразования // Вестник государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. №2. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/modelirovanie-atomnykh-konfiguratsiy-nanokristallov-na-stadii-zarodysheobrazovaniya>.
5. Заводинский Виктор Григорьевич, Горкуша Ольга Александровна, Плюснин Николай Иннокентьевич. Компьютерное моделирование смачивающих слоев Li и Be на поверхности Si (100) // Computational nanotechnology. 2024. №1. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/kompyuternoe-modelirovanie-smachivayuschih-sloev-li-i-be-na-poverhnosti-si-100>.
6. Исмаил Алмикад, Арутюнян Наталья Рафаэлевна, Образцова Екатерина Александровна, Натсуми Коматсу, Юничиро Коно, Образцова Елена Дмитриевна. Насыщающийся поглотитель на основе упорядоченных одностенных углеродных нанотрубок // Труды МФТИ. 2024. №2 (62). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/nasyschayushchisya-poglotitel-na-osnove-uporyadochennyh-odnostennyh-uglerodnyh-nanotrubok>.

7. Мажирина Ю.А., Мельников Л.А., Конюхов А.И. Генерация запутанных импульсов при взаимодействии солитонов и при распаде двухсолитонного бризера в волокне с переменной дисперсией // Фотон-экспресс. 2023. №6 (190). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/generatsiya-zaputannyh-impulsov-pri-vzaimodeystvii-solitonov-i-pri-raspade-dvuh-soliton-nogo-brizera-v-voлокне-s-peremennoy>.
8. Рахимов Рустам Хакимович. Импульсный туннельный эффект: фундаментальные основы и перспективы применения // Computational nanotechnology. 2024. №1. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/impulsnyy-tunnelnyy-effekt-fundamentalnye-osnovy-i-perspektivy-primeneniya>.
9. Самотугин Сергей Савельевич, Реуцкий Николай Михайлович, Шекшеев Максим Александрович. Математическое моделирование процесса плазменного наноструктурирования твердосплавного инструмента // Известия ТулГУ. Технические науки. 2024. №7. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/matematiceskoe-modelirovanie-protsesta-plazmennogo-nanostrukturirovaniya-tverdosplavnogo-instrumenta>.
10. Цыдыпов Дамдин Галсанович, Номоев Андрей Валерьевич, Гармаев Баир Заятуевич. Определение теплофизических свойств и функции радиального распределения наночастицы серебра с применением численных методов // Доклады АН ВШ РФ. 2023. №3 (60). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/opredelenie-teplofizicheskikh-svoystv-i-funktsii-radialnogo-raspredeleniya-nanochastitsy-serebra-s-primeneniem-chislennyh-metodov>.

---

© Силантьев Данила Михайлович (silad.micher@mail.ru)

Журнал «Современная наука: актуальные проблемы теории и практики»