

Лихопуд А. С., студент, Волох Л. В., доц.

Київський національний університет технологій та дизайну

МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ У НАНОТЕХНОЛОГІЯХ

Анотація. Розглянуто основні методи в нанотехнологіях, а саме: створення математичних моделей для систем «нанооб'єкт-вимірювальний прилад»; розробка теорії та моделей самозбірки наноматеріалів і нанопристроїв; дослідження просторово-часової самоорганізації на основі перших принципів. Досліджено основні етапи побудови математичних моделей та проблеми, які виникають при побудові.

Ключові слова: нанотехнології, математичні методи, наномеханіка, наноелектродинаміка, наноконструкції.

Lyhopud A., student, Volokh L., Assoc.

Kyiv National University of Technologies and Design

MATHEMATICAL METHODS IN NANOTECHNOLOGIES

Abstract. The main methods in nanotechnology are considered, namely: the creation of mathematical models for “nano-object-measuring device” systems; the development of theories and models of self-assembly of nanomaterials and nanodevices; research into space-time self-organization based on first principles. The main stages of constructing mathematical models and the problems that arise during construction are investigated.

Keywords: nanotechnology, mathematical methods, nanomechanics, nanoelectrodynamics, nanostructures.

Вступ. Математичне моделювання в нанотехнологіях – це використання математичних моделей для вивчення, прогнозування та розробки нанорозмірних матеріалів, пристроїв і процесів. Воно дозволяє аналізувати поведінку наноструктур, створювати віртуальні прототипи та оптимізувати процеси на атомному рівні за допомогою рівнянь, функцій та обчислювальних методів. Необхідність конструктивного вирішення актуальних проблем спонукає до проведення інтенсивних досліджень, які відкривають нові горизонти в обчислювальній фізиці та хімії. Розглянемо основні напрями таких досліджень, як нанометрологія, наномеханіка, наноелектродинаміка, нанооптика та теорія самоорганізації наноконструкцій, а також основні завдання в кожному з них.

Постановка завдання. Метою роботи є дослідження основних математичних моделей та систем основних сферах сучасних нанотехнологій, а також основні аспекти поєднання математичного та імітаційного моделювання.

Результати досліджень. У сфері *нанометрології* ключовими завданнями є створення комп'ютерних моделей систем «прилад-нанооб'єкт» для калібрування обладнання та автоматизація вимірювань на нанорівні з формуванням відповідних баз даних. Застосовуються такі **математичні методи**:

1. Статистичні методи та обробка похибок. Для аналізу вимірювань у наномасштабі важливі:

- ✓ **теорія похибок та невизначеності** (GUM – Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement);

- ✓ **методи Монте-Карло** для моделювання розподілу похибок;

- ✓ **Байєсівські методи** для оцінювання параметрів при малих вибірках;

- ✓ **регресійний аналіз** для визначення залежностей та калібрування нестандартних приладів.

2. Обробка сигналів. Прилади нанометрології (AFM, STM, SEM, TEM) генерують складні сигнали та зображення. Застосовують:

- ✓ **Фур'є-аналіз** для виділення низько- та високочастотних компонент.

- ✓ Вейвлет-перетворення для аналізу локальних особливостей сигналів.
- ✓ фільтрацію шумів (Вінер, Калмана).
- ✓ методи реконструкції зображень з неповних даних.

3. Математичне моделювання нанопроцесів. Для опису поведінки частинок та інструментів у наномасштабі використовуються:

- ✓ диференціальні рівняння (звичайні та з частинними похідними) – описують:
- ✓ рух зонда AFM, тунельні струми в STM, теплові флуктуації, дифузію атомів.
- ✓ методи молекулярної динаміки – моделюють атомні взаємодії.
- ✓ квантово-механічні розрахунки (наприклад, рівняння Шредингера для

тунелювання).

4. Методи обробки зображень. Для SEM/TEM/AFM зображень використовують:

- ✓ алгоритми сегментації (k-means, watershed, нейромережі).
- ✓ методи визначення країв (Собеля, Кенні).
- ✓ фрактальний аналіз для опису складних поверхонь.
- ✓ топографічні методи для відтворення 3D-профілів.

5. Інверсні задачі. Багато параметрів не можна виміряти напряму – їх відновлюють з даних:

- ✓ розв'язання некоректних інверсних задач (Тихоновська регуляризація).
- ✓ методи оптимізації (градієнтні, стохастичні).
- ✓ оцінювання параметрів моделі з експериментальних даних.

6. Методи калібрування та корекції. Для досягнення наноточності застосовують:

- ✓ Афінні та неафінні перетворення (виправлення спотворень AFM/SEM).
- ✓ Математичну лінеаризацію для корекції нелінійностей датчиків.
- ✓ Сплайни та інтерполяцію для реконструкції профілів поверхонь.

7. Математика квантових ефектів. У STM, нанофотоніці та квантових сенсорах використовують:

- ✓ оператори та матриці Гамільтоніана.
- ✓ методи матричної механіки.
- ✓ квантову статистику для флуктуацій.

Наномеханіка зосереджена на вивченні механічних напружень і деформацій у аноматеріалах, моделюванні рухів маніпуляторів при роботі з нанооб'єктами, аналізі ункціонування наномеханізмів у пристроях і розробці систем управління нанороботами [2].

У *наноелектродинаміці* особливу увагу приділено моделюванню динаміки молекул у неоднорідних електромагнітних полях, що утворюються зондами та багатовістряними системами, а також дослідженню електричних і магнітних властивостей матеріалів на нанорівні [4].

Нанооптика охоплює моделювання процесів випромінювання, поширення й поглинання світла в нанооб'єктах та розрахунок параметрів нанолазерів та їх поєднання з зондами у гібридні системи. У нанооптиці застосовують широкий спектр математичних методів, адже на нанорівні світло взаємодіє з матерією зовсім не так, як у класичній оптиці. Тут проявляються хвильові, квантові, плазмонні та нелінійні ефекти, які потребують складного математичного опису.

Наведемо найважливіші групи математичних методів у нанооптиці.

1. Рівняння Максвелла та чисельні розв'язки. Нанооптика майже повністю базується на вирішенні рівнянь Максвелла для складних наноструктур.

Використовуються методи:

FDTD (Finite-Difference Time-Domain) – скінченно-різницеві методи у часовій області.

FEM (Finite Element Method) – дуже точний для нерегулярних наногеометрій.

BEM (Boundary Element Method) – підходить для розрахунку плазмонних структур.

RCWA (Rigorous Coupled-Wave Analysis) – для періодичних нанорешіток [4].

Ці методи дозволяють моделювати:

- ✓ розсіювання світла;
- ✓ локалізацію електромагнітних полів;
- ✓ резонанси в наночастинках;
- ✓ плазмонні хвилі на металічних поверхнях.

2. Спектральний аналіз та теорія розсіювання. Для опису взаємодії світла з наночастинками використовують:

- ✓ **теорія Міє** – аналітичний опис розсіювання на сферах;
- ✓ **мультипольні розклади** (електричні та магнітні диполі, квадруполі тощо);
- ✓ **методи спектрального розкладу мод**:
- ✓ власні моди резонаторів;
- ✓ моди антен;
- ✓ квазі-нормальні моди (QNM).

3. Нелінійна математика. У матеріалах нанорозмірів часто проявляються нелінійні оптичні ефекти:

- розв’язання нелінійних хвильових рівнянь;**
- тензорний аналіз нелінійних сприйнятливостей χ^2, χ^3 ;**
- методи гармонічного аналізу;**
- генерація 2-ї та 3-ї гармонік;**
- змішування частот.**

4. Квантова оптика та квантові математичні методи. На наномасштабі оптичні явища часто мають квантову природу. Використовуються:

- ✓ **операторна алгебра квантової оптики;**
- ✓ **рівняння Ліндблада** – для відкритих квантових систем;
- ✓ **методи матриці густини** – для опису декогеренції;
- ✓ **розв’язання рівняння Шредінгера** для фотонних наноструктур;
- ✓ **квантові флуктуації та кореляційні функції.**

5. Методи обробки сигналів та реконструкції. У нанооптичних експериментах (SNOM, STED, PALM/STORM) [2]:

- ✓ **Фур’є-аналіз та фаза-відновлення;**
- ✓ **вейвлети для покращення зображень;**
- ✓ **методи перебудови (deconvolution);**
- ✓ **розв’язання інверсних задач** (відновлення наноструктур із оптичних сигналів);
- ✓ **регуляризація Тихонова** – для некоректних задач.

6. Стохастичні та статистичні методи (Монте-Карло, Байєсівські підходи, стохастичні диференціальні рівняння). Застосовуються для опису:

- ✓ шумів детекторів;
- ✓ флуктуацій поля;
- ✓ випадкової форми наночастинок.

7. Геометрична та диференціальна математика. Використовується для моделювання складних наногеометрій:

- ✓ криволінійних наноантен;
- ✓ фотонних кристалів;
- ✓ метаповерхонь.

8. Методи оптимізації та машинного навчання. Сучасна нанооптика активно використовує:

- ✓ **Градiєнтні методи**, гауссові процеси (Bayesian optimization)
- ✓ **Глибинні нейронні мережі** для:
- ✓ проєктування метаповерхонь,
- ✓ інверсного дизайну наночастинок,
- ✓ реконструкції полів.

Теорія самоорганізації наноконструкцій спрямована на формулювання фундаментальних принципів самозбирання наноконструкцій, створення комп'ютерних алгоритмів самозбирання, розробку обчислювальних алгоритмів для якісного аналізу моделей самозбірки та моделювання процесів при створенні наноматеріалів і явищ просторово-часової самоорганізації [1].

Важливо зазначити, що нові результати лабораторних експериментів часто потребують перегляду традиційних підходів і моделей. При вивченні нанооб'єктів слід відмовитися від концепції безперервного середовища, яка використовується в багатьох класичних моделях математичної фізики. Ігнорування експериментальних даних може призвести до хибних висновків, що підкреслює необхідність розробки нового курсу математичної фізики, адаптованого до специфіки нанорівневих процесів.

Ієрархічна система математичних моделей є ще одним важливим напрямом. Незважаючи на значний прогрес лабораторних досліджень, цього недостатньо для повного розуміння наноявищ, визначення умов формування просторово-часових структур і управління процесами створення наноматеріалів [5].

Ієрархічна система математичних моделей

Ключові рівні ієрархії:

- ✓ Квантові моделі
- ✓ Напівемпіричні квантові моделі
- ✓ ґратчасті моделі та імітаційне моделювання
- ✓ моделі реакція-дифузія
- ✓ моделі класичної молекулярної динаміки

Для ефективного вирішення зазначених проблем неможливо обійтися без застосування систем математичних моделей. Дослідження явищ на нанометровому рівні просторових розмірів потребує такого підходу: якщо ви здатні запропонувати математичну модель, алгоритм і комп'ютерну програму, здатні з достатньою точністю відтворити спостережуване в експерименті явище у широкому діапазоні зовнішніх параметрів, без протиріч із фізико-хімічними законами, це означає, що ви розумієте це явище.

Квантові моделі [8] привертають особливу увагу, оскільки дозволяють, виходячи з фундаментальних констант (стала Планка, заряд електрона, положення атома у таблиці Менделєєва), пояснити причину виникнення властивостей і явищ. Однак прямий розрахунок рівнянь Шредінгера для багатоелектронних систем потребує величезних обчислювальних ресурсів.

Напівемпіричні квантові моделі включають підганяючі параметри, але за умови їх правильної ідентифікації забезпечують точність передбачень, що не поступається експериментальній. Моделі молекулярної динаміки засновані на класичних рівняннях руху багаточастинкових систем і використовують різні потенціали взаємодії, що дає змогу проводити розрахунки руху, міцності й стійкості наноконструкцій.

Ґратчасті моделі та імітаційне моделювання за допомогою ймовірнісних асинхронних клітинних автоматів застосовуються для дослідження еволюції систем у масштабних часових межах. У рамках цих моделей еволюція представляє собою послідовність елементарних подій на ґратці певного типу, що дозволяє аналізувати

фазові переходи типу порядок-безлад і формування фаз. Інтеграція моделей молекулярної динаміки з алгоритмами імітаційного моделювання та нелінійного аналізу є перспективним напрямком, оскільки нелінійний аналіз молекулярної динаміки може передавати інформацію імітаційним моделям щодо шляхів еволюції системи, набору елементарних подій й енергій активації. Таке поєднання узгоджує моделі різних рівнів і дає змогу вивчати складну динаміку наносистем.

Моделі типу реакція-дифузія [7] базуються на системах квазілінійних параболічних рівнянь із нелінійними джерелами. Останніми роками вони широко застосовуються для опису еволюції неідеальних відкритих систем в мікронному просторовому масштабі. Ці моделі відіграли важливу роль у дослідженні просторово-часової самоорганізації в різноманітних фізичних, хімічних і біологічних процесах. Їхня привабливість полягає у наявності потужних інструментів якісного аналізу: методів групового аналізу та теорії розгалуження рішень нелінійних рівнянь, що дозволяють визначати стійкі стани та прогнозувати їх існування без необхідності проведення високовартісних обчислень.

Ефективне математичне моделювання на будь-якому рівні ієрархічної системи можливе за умови використання спеціалізованих програмних комплексів зі зручним інтерфейсом і розвиненими засобами візуалізації. Завдяки таким засобам більшість стандартних математичних задач може бути вирішена автоматично, залишаючи досліднику можливість втручання лише у складних випадках або на етапі аналізу результатів. Водночас розробка алгоритмів візуалізації та аналізу складних даних є окремим завданням, не менш складним, ніж створення базових обчислювальних алгоритмів. Такі програмні комплекси можуть використовуватись не тільки для науки, але й як навчальні тренажери для молодих спеціалістів, сприяючи розвитку їх дослідницької інтуїції в нових перспективних напрямках [9].

Фундаментальні проблеми математичного моделювання. Основними фундаментальними проблемами є:

- створення математичних моделей для систем «нанооб'єкт-вимірювальний прилад»;
- розробка теорії та моделей самозбірки наноматеріалів і нанопристроїв;
- дослідження просторово-часової самоорганізації на основі перших принципів.

Розв'язання першої проблеми забезпечить глибше розуміння того, які саме процеси візуалізуються під час лабораторних експериментів. Робота над другою проблемою, спираючись на ідеї Джона фон Неймана, сприятиме створенню технологій промислового виробництва надміцних матеріалів. Вирішення третьої проблеми дозволить вивести теорію просторово-часової самоорганізації на якісно новий рівень [10]. Також слід зауважити наступні моменти:

- ✓ **Некоректність і нестійкість** – більшість реальних задач інверсні.
- ✓ **Багатомасштабність** – не існує універсальної моделі.
- ✓ **Невизначеність параметрів** – даних часто мало, а шум великий.
- ✓ **Обчислювальна складність** – сучасні моделі «важчі», ніж доступні ресурси.
- ✓ **Валідація** – складно довести, що модель адекватна.

Висновки. Успіх у цій перспективній галузі значною мірою залежить від поєднання прецизійних методів лабораторного експерименту, теорії систем «об'єкт-прилад», молекулярної та атомної теорії в умовах сильно неоднорідних електромагнітних полів, багаторівневих ієрархічних систем математичних моделей, конструктивних методів математичного аналізу й спеціалізованого програмного забезпечення. Таке програмне забезпечення повинне мати гнучкий інтерфейс і потужні можливості візуалізації для ефективного розв'язання проблем, що складно формалізувати.

Список використаних джерел:

1. Akiyama, N., Nakagawa, Y., Uchida, S., & Tochikubo, F. (2021). Monte Carlo simulation of electrons injected from a low-temperature plasma into liquid water. *Journal of Applied Physics*, 129, 163304. <https://doi.org/10.1063/5.0044024>.
2. Bilak, Y. (2025). Information system based on a complex model using machine learning for spectral analysis. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Physical and Mathematical Sciences*, 80(1), 104–114. <https://doi.org/10.17721/1812-5409.2025/1.14>.
3. Méndez-Giono, J. A., Minea, T., Thuillier, T., & Revel, A. (2022). Self-consistent Monte Carlo model for ECRIS plasma simulation. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2244, 012027. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2244/1/012027>.
4. Білак Ю., Геращенко Е. Багаторівнева декомпозиція для адаптивного чисельного моделювання складних фізичних процесів. *Herald of Khmelnytskyi National University. Technical Sciences*. 2025. № 349 (2). С. 51–62. <https://doi.org/10.31891/2307-5732-2025-349-7>.
5. Кушніров П. В., Євтухов А. В., Дегтярьов І. М. Системно-структурне моделювання технологічних процесів і систем: навчальний посібник. Суми: Сумський державний університет, 2023. 134 с.
6. Математичне моделювання систем і процесів: конспект лекцій / уклад. Н. В. Богданова, О. В. Богданов. Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. 85 с.
7. Щербань В. Ю., Колиско О. З., Щербань Ю. Ю. та ін. Математичне моделювання систем і технологічних процесів. Київ: ТОВ "Фастбінд Україна", 2023. 938 с. URL: https://nubip.edu.ua/sites/default/files/robocha_programa_modelyuvannya_0.pdf.
8. Zhang, Z., Hu, L., Wang, R., Zhang, S., Fu, L., Li, M., & Xiao, Q. (2024). Advances in Monte Carlo method for simulating the electrical percolation behavior of conductive polymer compo-sites with a carbon-based filling. *Polymers*, 16(4), 545. <https://doi.org/10.3390/polym16040545>.
9. Кветний Р. Н., Богач І. В., Бойко О. Р. та ін. Комп'ютерне моделювання систем та процесів. Вінниця: ВНТУ, 2021. 235 с.
10. Terven, J., Cordova-Esparza, D. M., Ramirez-Pedraza, A., & Chávez Urbiola, E. (2023). Loss Functions and Metrics in Deep Learning. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2307.02694>.