

УДК 004.414

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И АЛГОРИТМ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО КЛАСТЕРА С МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Иброхимов Нодирбек Икромжонович, докторант (DSc), Ферганский государственный технический университет, Фергана, Республика Узбекистан
e-mail: n.ibroximov1986@gmail.com

Расулов Акбарали Махаматович, доктор физико-математических наук, профессор, Ферганский государственный технический университет, Фергана, Республика Узбекистан
e-mail: akbaralirasulov1959@gmail.com

Аннотация. Целью данной работы является разработка математической модели и параллельного алгоритма для моделирования процесса осаждения металлического кластера на поверхность монокристалла методом молекулярной динамики. В исследовании использованы уравнения движения Ньютона, многотельный потенциал EAM, схема численного интегрирования Velocity-Verlet, а также методы оптимизации вычислений, основанные на радиусе отсечения, списке ближайших соседей и MPI-параллелизации с доменной декомпозицией. В результате предложена комплексная модель системы «кластер–поверхность», обеспечивающая описание временной эволюции атомной конфигурации, расчёт сил межатомного взаимодействия, мониторинг изменений термодинамических параметров, а также анализ энергетических и структурных характеристик процесса осаждения. Научная новизна работы заключается в интеграции физически обоснованной математической модели, численно устойчивой схемы интегрирования и адаптации алгоритма к высокопроизводительным параллельным вычислительным архитектурам в рамках единого вычислительного подхода. Практическая значимость определяется возможностью применения разработанного алгоритма для крупномасштабного моделирования наноразмерных поверхностных процессов при приемлемой вычислительной сложности и высокой эффективности.

Ключевые слова: молекулярная динамика, EAM, MPI, металлический кластер, монокристалл.

Для цитирования: Иброхимов Н. И., Расулов А. М. Математическая модель и алгоритм моделирования процесса взаимодействия металлического кластера с монокристаллической поверхностью // Шаг в науку. – 2026. – № 2. – С. 15–21.

MATHEMATICAL MODEL AND ALGORITHM FOR MODELING THE PROCESS OF INTERACTION OF A METAL CLUSTER WITH A SINGLE-CRYSTAL SURFACE

Ibrokhimov Nodirbek Ikromjonovich, PhD student (DSc), Fergana State Technical University, Fergana, Republic of Uzbekistan
e-mail: n.ibroximov1986@gmail.com

Rasulov Akbarali Makhmatovich, Doctor of Physical-Mathematical Sciences, Professor, Fergana State Technical University, Fergana, Republic of Uzbekistan
e-mail: akbaralirasulov1959@gmail.com

Abstract. The aim of this work is to develop a mathematical model and a parallel algorithm for simulating the process of metal cluster deposition on a single crystal surface using the molecular dynamics method. The study utilizes Newton's equations of motion, the EAM many-body potential, the Velocity-Verlet numerical integration scheme, and computational optimization methods based on the cutoff radius, the nearest neighbor list, and MPI parallelization with domain decomposition. As a result, a comprehensive model of the cluster-surface system is proposed, providing a description of the temporal evolution of the atomic configuration, calculation of interatomic interaction forces, monitoring of changes in thermodynamic parameters, and analysis of the energy and structural characteristics of the



deposition process. The scientific novelty of the work lies in the integration of a physically based mathematical model, a numerically stable integration scheme, and adaptation of the algorithm to high-performance parallel computing architectures within a unified computational approach. The practical significance of the developed algorithm is determined by the possibility of applying it to large-scale simulations of nanoscale surface processes with acceptable computational complexity and high efficiency.

Key words: *molecular dynamics, EAM, MPI, metal cluster, single crystal.*

Cite as: Ibrokhimov, N. I., Rasulov, A. M. (2026) [Mathematical model and algorithm for modeling the process of interaction of a metal cluster with a single-crystal surface]. *Shag v nauku* [Step into science]. Vol. 2, pp. 15–21.

Введение

В современной науке о материалах и нанозлектронике точное моделирование процессов на атомном уровне имеет важное научно-практическое значение. В частности, исследование процесса взаимодействия металлических кластеров с поверхностью монокристалла играет ключевую роль при формировании тонких плёнок, модификации поверхностных свойств и создании наноструктурированных материалов.

Поскольку взаимодействие металлических кластеров с поверхностью протекает на атомном уровне, в чрезвычайно малых временных интервалах (в диапазоне фемтосекунд-пикосекунд) и в нанометровом масштабе, прямое экспериментальное наблюдение и анализ таких процессов в реальных лабораторных условиях представляет значительные трудности. Это требует применения высокоточного оборудования и одновременного контроля множества параметров.

В связи с этим для глубокого и систематического изучения подобных процессов широко применяется метод молекулярной динамики (MD). С помощью MD движение атомов и их взаимодействие моделируются на основе математических моделей в вычислительной среде. Эволюция системы во времени, процессы обмена энергией и структурные изменения анализируются путём численного интегрирования уравнений движения на основе законов Ньютона [5].

Моделирование крупных систем, состоящих из большого числа атомов, требует значительных вычислительных ресурсов. При прямом учёте взаимодействий между всеми парами атомов вычислительная сложность алгоритма составляет $O(N^2)$, то есть объём вычислений возрастает по квадратичному закону с увеличением числа атомов.

В практических расчётах используются методы оптимизации, такие как радиус отсечения (cutoff radius) и список соседей (neighbor list), при которых учитываются только взаимодействия между близко расположенными атомами. В результате общая вычислительная сложность снижается до $O(N)$, что позволяет эффективно моделировать крупные системы [2].

Таким образом, для каждого атома достаточно учитывать взаимодействие не со всеми атомами системы, а только с ближайшими соседями. Это существенно

ускоряет расчёты и делает возможным моделирование больших систем.

Тем не менее, для систем, содержащих сотни тысяч атомов, необходимы высокопроизводительные параллельные вычислительные архитектуры. Данная задача включает два основных направления:

1. Построение корректной математической модели для системы с большим числом атомов и совершенствование численных алгоритмов расчёта движения атомов, то есть физически адекватное описание процесса и разработка точных вычислительных методов.

2. Адаптация разработанных алгоритмов к высокопроизводительным параллельным вычислительным системам, то есть распределение вычислений между несколькими процессорами с целью сокращения общего времени выполнения расчётов [6; 7].

Технология MPI (Message Passing Interface), основанная на доменной декомпозиции (метод параллельных вычислений, при котором моделируемое пространство разбивается на небольшие области, и каждая из них обрабатывается отдельным процессором), является одним из наиболее эффективных параллельных подходов при выполнении крупномасштабных молекулярно-динамических расчётов.

Основная идея данного метода заключается в разделении всей вычислительной области (то есть моделируемого пространственного объёма) на небольшие участки – поддомены. Каждый поддомен закрепляется за отдельным процессором, который выполняет вычисления только для атомов, находящихся в пределах его области.

Например, если система состоит из 1 миллиона атомов и используется 16 процессоров, расчётная область делится на 16 частей. Каждый процессор обрабатывает приблизительно 1/16 часть атомов. Поскольку все процессоры выполняют вычисления одновременно (параллельно), общее время расчёта существенно сокращается.

Однако межатомные взаимодействия не ограничиваются пределами одного поддомена. Атомы, расположенные вблизи границы, могут взаимодействовать с атомами соседних доменов. В связи с этим посредством технологии MPI осуществляется обмен данными между процессорами. В данном процессе временно передаются так называемые «ghost-атомы» (копии

атомов соседних доменов), которые учитываются при расчёте сил.

Доменная декомпозиция обеспечивает следующие преимущества:

- вычислительная нагрузка равномерно распределяется между процессорами;
- снижается потребление памяти, поскольку каждый процессор хранит только атомы своего поддомена;
- становится возможным эффективное моделирование крупномасштабных систем;
- вычислительная сложность на практике приближается к линейному масштабированию.

В то же время с увеличением числа процессоров возрастают затраты на межпроцессорную коммуникацию. При чрезмерном уменьшении размеров доменов значительная часть времени расчёта начинает расхо-

доваться на обмен данными. Таким образом, выбор оптимального числа процессоров и балансировка нагрузки являются критически важными задачами.

Метод исследования

Для металлических систем потенциал Embedded Atom Method (EAM) представляет собой эффективную модель, учитывающую многотельные межатомные взаимодействия [4].

Данный потенциал описывает полную энергию системы как сумму функции внедрения, зависящей от локальной электронной плотности атома, и парной функции межатомного взаимодействия, представленной в формуле (1).

В рамках модели EAM полная энергия системы записывается следующим образом:

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi_j(r_{ij}), \quad (1)$$

где:

$F_i(\rho_{h,i})$ – энергия внедрения (embedding energy) атома в электронную среду;

$\phi_j(r_{i,j})$ – энергия парного взаимодействия между атомами i и j ;

r_{ij} – расстояние между атомами;

$\rho_{h,i}$ – локальная электронная плотность в положении i -го атома.

Сила, действующая на атом, определяется через градиент полной энергии системы:

$$F_i = -\nabla_i E_{total} \quad (2)$$

Математическая модель процесса взаимодействия металлического кластера с поверхностью

Моделирование процесса осаждения металлического кластера на поверхность монокристалла требует описания временной эволюции многотельной атомистической системы. В данном исследовании

процесс моделировался методом молекулярной динамики (MD) [1; 3].

Физическое описание системы. Система состоит из двух основных частей: монокристаллической подложки (substrate), содержащей $N_{\text{подложка}}$ атомов, и металлического кластера, состоящего из $N_{\text{кластер}}$ атомов. Общее число атомов системы определяется формулой (3):

$$N = N_s + N_c. \quad (3)$$

Атомы расположены в трёхмерном пространстве. Координаты каждого атома задаются вектором положения $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ а его скорость – вектором v_i .

Уравнения движения. Движение атомов в системе, как отмечалось выше, описывается вторым законом Ньютона:

$$F_i = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2}, \quad (4)$$

где

F_i – суммарная сила, действующая на i -й атом (эВ/Å);

m_i – масса i -го атома (г/моль);

r_i – вектор положения атома в пространстве (Å);

t – время (пс);

$d^2 r_i / dt^2$ – ускорение (Å/пс²).

Сила определяется через градиент потенциальной энергии системы:

$$(F_i = -\nabla_i E).$$

Энергия межатомного взаимодействия (модель EAM). Для металлических систем применяется потенциал Embedded Atom Method (EAM). Полная потенци-

альная энергия системы определяется формулой (1). Локальная электронная плотность определяется выражением:

$$\rho_i = \sum_{i,j}^{i \neq j} f(r_{ij}). \quad (5)$$

Начальные и граничные условия. Атомы подложки размещаются на основе гранецентрированной кубической (FCC) кристаллической решётки. Металли-

ческий кластер располагается над поверхностью на заданной высоте и ему придаётся начальная скорость, направленная в сторону подложки.

$$E_k = \frac{1}{2} m v_0^2, \quad (6)$$

где

E_k – кинетическая энергия (эВ);
 v_0 – начальная скорость (Å/пс).

Схема численного интегрирования. Уравнения движения дискретизируются с использованием алгоритма Velocity-Verlet:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t + \frac{1}{2} \frac{F_i(t)}{m_i} \Delta t^2, \quad (7)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{F_i(t) + F_i(t + \Delta t)}{2m_i} \Delta t. \quad (8)$$

Данная схема обеспечивает хорошее сохранение полной энергии системы и обладает высокой численной устойчивостью.

Термодинамические величины. Кинетическая энергия системы:

$$E_{kin} = \sum_{i,j}^{i \neq j} \frac{1}{2} m_i v_i^2. \quad (9)$$

Полная энергия:

$$E_{total} = E_{kin} + E_{pot}. \quad (10)$$

Температура системы:

$$T = \frac{2E_{kin}}{3Nk_B}. \quad (11)$$

Вычислительная сложность. При использовании метода попарного сравнения взаимодействий:

$$O(N^2). \quad (12)$$

При применении списка соседей и радиуса отсечения:

$$O(N). \quad (13)$$

Это обеспечивает эффективное выполнение вычислений для крупномасштабных систем.

Модель параллельной реализации. Вычислительная область разделяется на PPP поддоменов:

$$T(P) = T_{comp}(P) + T_{comm}(P). \quad (14)$$

Ускорение и эффективность параллельных вычислений определяются как:

$$S(P) = \frac{T(1)}{T(P)}, \quad (15)$$

$$E(P) = \frac{S(P)}{P}. \quad (16)$$

Разработанная математическая модель комплексно описывает многотельные процессы взаимодействия в системе «металлический кластер – поверхность» и определяет движение атомов путём численного интегрирования уравнений Ньютона. Модель адаптирована к параллельным вычислительным архитектурам, что обеспечивает эффективное распределение вычислительной нагрузки и позволяет с высокой точностью моделировать крупномасштабные атомные системы.

Результаты и анализ

В рамках данного исследования был разработан поэтапный вычислительный алгоритм для моделирования процесса осаждения металлического кластера на поверхность монокристалла, представленный на рисунке 1. Основным результатом разработки алгоритма заключается в том, что процесс депозиции объединяет все ключевые этапы молекулярно-динамического расчёта (начальные настройки, выбор потенциала, задание динамических параметров, термодинамический мониторинг, итерационное интегрирование и сохранение результатов) в единый логический поток, обеспечивающий последовательное отслеживание энергетического и структурного поведения системы.

Вычислительный процесс начинается с запуска программы. На первом этапе определяется программная среда, система единиц и основные вычислительные параметры. Далее на этапе начальной настройки задаются размеры расчётной области, граничные условия и тип кристаллической решётки. Формируется геометрическая модель монокристаллической подложки и устанавливаются исходные параметры моделирования. На следующем этапе из data-файла загружаются данные о кластере и подложке, включая координаты атомов, их типы и массы, после чего формируется начальная конфигура-

ция системы. Затем выбирается модель межатомного взаимодействия, активируется соответствующий металлической системе потенциал (EAM) и выполняется его связывание с типами атомов. На этапе настройки параметров молекулярной динамики задаются шаг интегрирования по времени, общее число шагов и метод интеграции, что определяет продолжительность расчёта. На этапе термодинамических настроек выбираются контролируемые физические величины (температура, кинетическая энергия, потенциальная энергия, полная энергия и другие параметры), а также устанавливается механизм их регистрации. Далее задаются начальные условия для атомов подложки. При необходимости нижние слои атомов фиксируются либо вводится термостат для достижения равновесного состояния системы. Затем атомам кластера придаётся начальная скорость в заданном направлении. Эта скорость определяет энергию депозиции и характер взаимодействия кластера с поверхностью. Перед началом основного расчёта система проходит короткий этап релаксации (перезвешивания), обеспечивающий физически корректные начальные условия. После этого запускается итерационный вычислительный цикл. На каждом временном шаге вычисляются межатомные расстояния и на основе выбранного потенциала рассчитываются силы взаимодействия. На основе рассчитанных сил обновляются координаты и скорости атомов, то есть система продвигается на один временной шаг вперёд. Если текущий шаг кратен 500, термодинамические параметры системы записываются в специальный лог-файл. В него сохраняются значения температуры, энергий и других физических величин, что обеспечивает возможность последующего анализа. Если текущий шаг кратен 1000, пространственные координаты атомов записываются в отдельный файл формата *.xyz. Эти файлы позволяют проводить ви-

зуальный и количественный анализ структурных изменений. Вычислительный процесс продолжается до достижения заданного максимального числа шагов, то есть до выполнения условия $\text{run} < 1000000$. После завершения симуляции сохраняется финальная кон-

фигурация системы и основные физические параметры. Затем вычислительный процесс завершается, а полученные результаты подготавливаются для углублённого физического анализа взаимодействия металлического кластера с поверхностью.

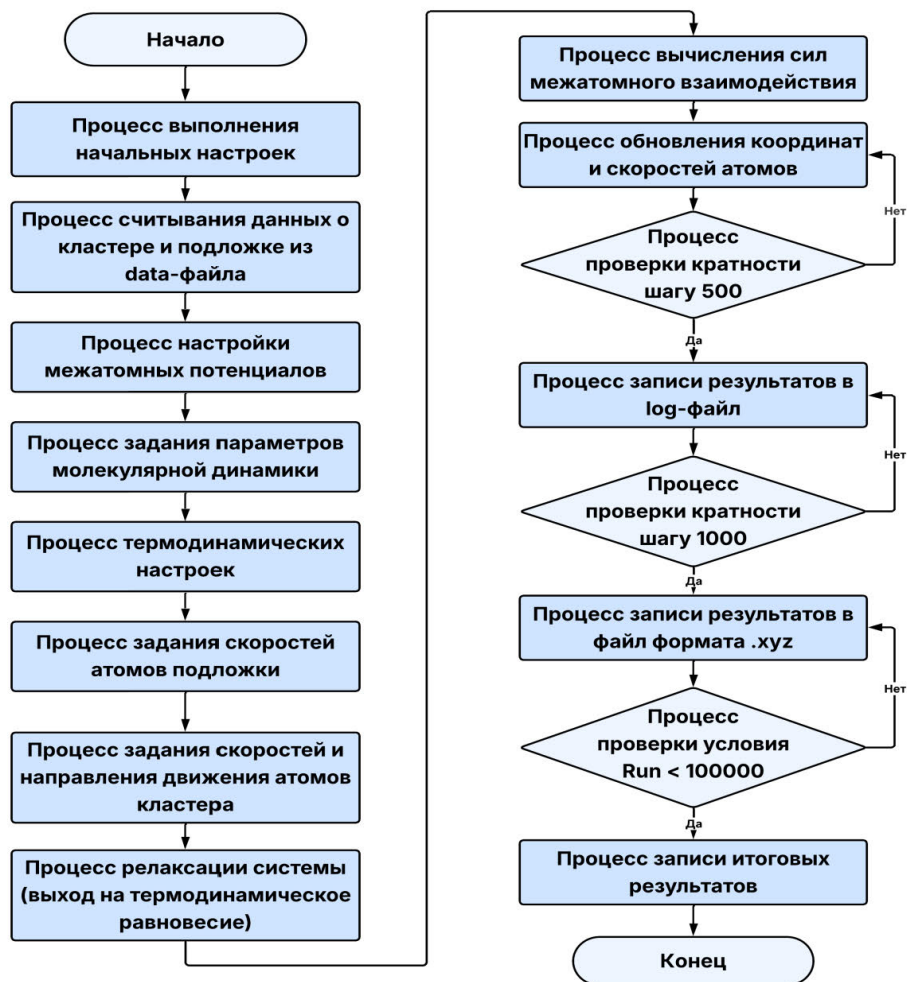


Рисунок 1. Алгоритм моделирования процесса взаимодействия металлического кластера с поверхностью монокристалла

Источник: разработано авторами

Заклучение

Математическая модель, представленная в третьем разделе статьи, и предложенный алгоритм образуют единую взаимосвязанную вычислительную систему. Математическая модель на основе уравнений движения Ньютона, многотельного потенциала ЕАМ и функции локальной электронной плотности физически обосновывает межатомные взаимодействия в системе «кластер-поверхность». Данное теоре-

тическое описание позволяет определить функционал полной энергии системы, силы взаимодействия и её временную эволюцию.

Предложенный алгоритм трансформирует данную математическую модель в последовательность практических вычислительных этапов. Иными словами, выражения энергии и сил, определённые в модели, вычисляются на каждом временном шаге в рамках итерационного цикла, после чего обновляются коор-

динаты и скорости атомов, а результаты поэтапно сохраняются.

Этапы алгоритма – задание начальных параметров, выбор потенциала, назначение начальных скоростей, вычисление сил, интегрирование уравнений движения и сохранение результатов – обеспечивают численную реализацию уравнений, представленных в математической модели.

Таким образом, если математическая модель отражает физическую сущность процесса, то разработанный алгоритм обеспечивает последовательную

и эффективную реализацию данной теоретической основы в вычислительной среде.

В результате процесс осаждения металлического кластера на поверхность монокристалла моделируется в рамках единого интегрированного подхода, основанного на физически обоснованной теории, численной устойчивости и адаптации к параллельным вычислительным архитектурам. Это создаёт надёжную научную основу для углублённого анализа наноразмерных поверхностных процессов и определения их энергетических и структурных характеристик.

Литература

1. Кручинин Н. Ю. Молекулярно-динамическое моделирование конформаций макроцепей на поверхности металлических наночастиц // Шаг в науку. – 2024. – № 4. – С. 4–10. – EDN: JSNHAZ.
2. Allen M. P., Tildesley D. J. (2017) Computer simulation of liquids. – 2nd ed. – Oxford: Oxford University Press. – 640 p. – <https://doi.org/10.1093/oso/9780198803195.001.0001>. (In Eng.).
3. B y kata M. (2006) Molecular-dynamics study of possible packing sequence of medium size gold clusters: Au₂–Au₄₃. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. – Vol. 33. – No. 1, pp. 182–190. – <https://doi.org/10.1016/j.physe.2006.02.002>. (In Eng.).
4. Daw M. S., Baskes M. I. (1984) Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*. – Vol. 29. – No. 12, pp. 6443–6453. – <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>. (In Eng.).
5. Frenkel D., Smit B. (2002) *Understanding molecular simulation: From algorithms to applications*. – 2nd ed. – Academic Press. – <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-267351-1.X5000-7>. (In Eng.).
6. Hockney R. W., Eastwood J. W. (1988) *Computer simulation using particles*. – New York: Taylor & Francis Group. – 540 p. – <https://doi.org/10.1201/9780367806934>. (In Eng.).
7. Plimpton S. (1995) Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*. – Vol. 117. – No. 1, pp. 1–19. – <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>. (In Eng.).

Статья поступила в редакцию: 25.02.2026; принята в печать: 22.04.2026.

Авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.