



ISSN 2949-5083 (print)
ISSN 2949-5067 (online)

ПРО
СВЕТ

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ
ПРОСВЕЩЕНИЯ

Вестник

ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА
ПРОСВЕЩЕНИЯ

Серия

ФИЗИКА-
МАТЕМАТИКА

Vestnik Gosudarstvennogo universiteta prosveshcheniya.

Seriya: Fizika-Matematika

BULLETIN OF FEDERAL STATE UNIVERSITY OF EDUCATION.

DSERIES: PHYSICS AND MATHEMATICS.

МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОГО БЛОКА
(001) NI ДЛЯ ЗАДАЧ
ИОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ:
РЕЛАКСАЦИЯ И ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ
УДАРНЫХ ВОЛН В СЫПУЧЕМ
И МОНОЛИТНОМ АНДЕЗИТЕ
МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ
ИНТЕРФЕРОМЕТРИИ



2025/№ 2

ВЕСТНИК
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

ISSN 2949-5083 (print)

2025/ № 2

ISSN 2949-5067 (online)

серия

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА

Рецензируемый научный журнал. Основан в 1998 г.

Журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика» включён в «Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук» Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации (см.: Список журналов на сайте ВАК при Минобрнауки России) по следующим научным специальностям: 1.3.3. – Теоретическая физика (физико-математические науки); 1.3.8. – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

The peer-reviewed journal was founded in 1998

“Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics” is included by the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation into “The List of reviewed academic journals and periodicals recommended for publishing in corresponding series basic research thesis results for a Ph.D. Candidate or Doctorate Degree” (See: the online List of journals at the site of the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation) on the following scientific specialties: 1.3.3. – Theoretical physics (physical-mathematical sciences); 1.3.8. – Physics of the condensed state (physical-mathematical sciences) (See: the online List of journals at the site of the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation).

ISSN 2949-5083 (print)

2025 / № 2

ISSN 2949-5067 (online)

series

PHYSICS AND MATHEMATICS

BULLETIN
OF FEDERAL STATE UNIVERSITY
OF EDUCATION

Учредитель журнала

«Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика»
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
Государственный университет просвещения

Выходит 4 раза в год

Редакционная коллегия

Главный редактор:

Чигринов В. Г. – д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения, Гонконгский университет науки и технологий (Китай)

Заместитель главного редактора:

Кузнецов М. М. – д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения

Ответственный секретарь:

Чукаловская Е. М. – Государственный университет просвещения

Члены редакционной коллегии:

Беляев В. В. – д. т. н., проф., Государственный университет просвещения;

Боголюбов Н. Н. – д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

Бугримов А. Л. – д. т. н., проф., Российский государственный университет имени А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство);

Гладков С. О. – д. ф.-м. н., проф., Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет);

Емельяненко А. В. – д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

Жачкин В. А. – д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения;

Калашников Е. В. – д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения;

Осипов М. А. – д. ф.-м. н., проф., Университет Стратклайд (Великобритания);

Рыбаков Ю. П. – д. ф.-м. н., проф., Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы;

Чаругин В. М. – д. ф.-м. н., проф., Московский педагогический государственный университет

ISSN 2949-5083 (print)

ISSN 2949-5067 (online)

Рецензируемый научный журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика» публикует статьи по математическим проблемам термодинамики, кинетики и статистической физики; теории конденсированного состояния классических и квантовых, макроскопических и микроскопических систем; изучению различных состояний вещества и физических явлений в них; статистической физике и кинетической теории равновесных и неравновесных систем; теоретическому и экспериментальному исследованию физических свойств неупорядоченных неорганических систем; изучению экспериментального состояния конденсированных веществ и фазовых переходов в них. Журнал адресован учёным, докторантам, аспирантам и всем, интересующимся достижениями физико-математических наук.

Журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия Физика-Математика» зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия. Регистрационное свидетельство ПИ № ФС 77-73344.

Индекс серии «Физика-математика» по Объединённому каталогу «Пресса России» 40723

Журнал включён в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), имеет полнотекстовую сетевую версию в интернете на платформе Научной электронной библиотеки (www.elibrary.ru), с августа 2017 г. на платформе Научной электронной библиотеки «КиберЛенинка» (www.cyberleninka.ru), а также на сайте журнала «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика» (www.physmathmgou.ru).

При цитировании ссылка на конкретную серию «Вестника Государственного университета просвещения» обязательна. Публикация материалов осуществляется в соответствии с лицензией Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

Ответственность за содержание статей несут авторы. Мнение автора может не совпадать с точкой зрения редколлегии серии журнала. Рукописи не возвращаются.

Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. – 2025. – № 2. – 74 с.

© Государственный университет просвещения, 2025.

Адрес редакции:

г. Москва, ул. Радио, д.10А, стр. 2, офис 98
тел.: (495) 780-09-42 (доб. 6101)
e-mail: sj@guppros.ru; сайт: www.physmathmgou.ru.

Founder of journal
“Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics”
Federal State University of Education

————— Issued 4 times a year —————

Editorial board

Editor-in-chief:

V. G. Chigrinov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Federal University of Education, Hong Kong University of Science and Technology (China)

Deputy editor-in-chief:

M. M. Kuznetsov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Federal State University of Education

Executive secretary:

E. M. Chukalovskaya – Federal State University of Education

Members of Editorial Board:

V. V. Belyaev – Dr. Sci. (Engineering), Professor, Federal State University of Education;

N. N. Bogolyubov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Lomonosov Moscow State University;

A. L. Bugrimov – Dr. Sci. (Engineering), Professor, The Kosygin State University of Russia;

S. O. Gladkov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Moscow Aviation Institute (National Research University);

A. V. Emelyanenko – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Lomonosov Moscow State University;

V. A. Zhachkin – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Federal State University of Education;

E. V. Kalashnikov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Federal State University of Education;

M. A. Osipov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, University of Strathclyde (Glasgow, UK);

Yu. P. Rybakov – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, People’s Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba;

V. M. Charugin – Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Professor, Moscow State Pedagogical University

ISSN 2949-5083 (print)

ISSN 2949-5067 (online)

The reviewed scientific journal “Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics” publishes articles on mathematical problems of thermodynamics, kinetics and statistical physics; the theory of the condensed state of classical and quantum, macroscopic and microscopic systems; the study of various states of substance and physical phenomena in them; statistical physics and the kinetic theory of equilibrium and non-equilibrium systems; theoretical and experimental research of physical features of disordered inorganic systems; the study of the experimental state of condensed substances and phase transitions in them. The journal is addressed to scientists, doctoral students, PhD students and everyone interested in the achievements of physical and mathematical sciences.

The series “Physics and Mathematics” of the Bulletin of Federal State University of Education is registered in Federal service on supervision of legislation observance in sphere of mass communications and cultural heritage protection. The registration certificate ПИ № 0С 77 – 73344.

Index series “Physics and Mathematics” according to the union catalog “Press of Russia” 40723

The journal is included into the database of the Russian Science Citation Index, and its full texts are available through scientific electronic libraries “eLibrary” (www.elibrary.ru) and “CyberLeninka” (since August 2017; www.cyberleninka.ru), as well as on the site of “Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics” (www.physmathmgou.ru).

At citing the reference to a particular series of “Bulletin of State University of Education” is obligatory. Scientific publication of materials is carried out in accordance with the license of Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

The authors bear all responsibility for the content of their papers. The opinion of the Editorial Board of the series journal does not necessarily coincide with that of the author. Manuscripts are not returned.

Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics. – 2025. – № 2. – 74 p.

© Federal State University of Education, 2025.

The Editorial Board address:

ulitsa Radio 10A build.2, office 98, Moscow, Russia

Phone: (495) 780-09-42 (add. 6101)

e-mail: sj@guppros.ru; site: www.physmathmgou.ru.

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

- Вековищев М.П., Кирсанов Е.А.* Вязкоупругость полимерного гидрогеля в рамках структурной модели 6
- Камалов Т. Ф.* Принцип устойчивости в физике неинерциальных систем отсчёта 19
- Мусин А. И.* Моделирование атомного блока (001) Ni для задачи ионного распыления: релаксация и основные параметры. 27
- Павлов В. Д.* Кинетический момент квантовых систем и размер атома гелия 47
- Зиборов В. С., Ростилов Т. А., Дольников Г. Г.* Исследование структуры ударных волн в сыпучем и монолитном андезите методом лазерной интерферометрии. 55

МАТЕМАТИКА

- Титов Е. К.* Применение цифровых и квантовых алгоритмов в модели нечёткой информационной ситуации для управления рисками инвестирования 66

CONTENTS

PHYSICS

- M. Vekovishchev, E. Kirsanov.** Viscoelasticity of polymer hydrogel within the framework of the structural model6
- T. Kamalov.** The stability principle in physics of non-inertial reference frames 19
- A. Musin.** Simulation of atomic block (001) Ni for ion sputtering problems: relaxation and main parameters 27
- V. Pavlov.** Kinetic momentum of quantum systems and the size of the helium atom 47
- V. Ziborov, T. Rostilov, G. Dolnikov.** Investigation of the structure of shock waves in loose and monolithic andesite by laser interferometry ... 55

MATHEMATICS

- E. Titov.** Application of digital and quantum algorithms in fuzzy information situation model for investment risk management 66

Научная статья

УДК 541. 182. 022: 532. 135

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-2-6-18

ВЯЗКОУПРУГОСТЬ ПОЛИМЕРНОГО ГИДРОГЕЛЯ В РАМКАХ СТРУКТУРНОЙ МОДЕЛИ

*Вековищев М. П.**, *Кирсанов Е. А.*

*Государственный социально-гуманитарный университет, Московская обл., г. Коломна,
Российская Федерация*

**Корреспондирующий автор, e-mail: mpv.71@mail.ru*

Поступила в редакцию 17.06.2025

Принята к публикации 18.06.2025

Аннотация

Цель: рассмотреть вязкоупругие характеристики полимерного гидрогеля, а именно гидрогеля поливинилпирролидона и карбоксиметилцеллюлозы, которые были получены для двух значений амплитуды деформации в свежем образце и в набухшем образце гидрогеля.

Процедура и методы. Проведена аппроксимация экспериментальных данных динамических измерений уравнениями структурной реологической модели на отдельных интервалах циклической частоты сдвиговых колебаний.

Результаты. Показана возможность применения уравнений структурной модели для описания частотных зависимостей динамических модулей. Величина коэффициентов реологических уравнений зависит как от амплитуды деформации, так и от исходного состояния гидрогеля.

Теоретическая и/или практическая значимость. Показано, что уравнения структурной реологической модели способны аппроксимировать экспериментальные данные динамических измерений, полученные для образцов гидрогеля при разных амплитудах деформации.

Ключевые слова: полимерный гидрогель, вязкоупругость, модули потерь, модули накопления, структурная реологическая модель

Для цитирования.

Вековищев М. П., Кирсанов Е. А. Вязкоупругость полимерного гидрогеля в рамках структурной модели // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 2. С.6–18. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-6-18>

Original research article

VISCOELASTICITY OF POLYMER HYDROGEL WITHIN THE FRAMEWORK OF THE STRUCTURAL MODEL

M. Vekovishchev, E. Kirsanov.*

State University of Humanities and Social Studies, Kolomna, Moscow region, Russian Federation

**Corresponding author, e-mail: mpv.71@mail.ru*

Received by the editorial office 17.06.2025

Accepted for publication 18.06.2025

Abstract

Aim: to consider the viscoelastic characteristics of a polymer hydrogel, namely, a polyvinylpyrrolidone and carboxymethylcellulose hydrogel, which were obtained for two values of the deformation amplitude in a fresh sample and in a swelled hydrogel sample.

Methodology. An approximation of the experimental data of dynamic measurements by the equations of the structural rheological model was carried out at individual intervals of the cyclic frequency of shear oscillations.

Results. The possibility of using the equations of the structural model to describe the frequency dependences of dynamic moduli is shown. The value of the coefficients of the rheological equations depends on both the deformation amplitude and the initial state of the hydrogel.

Research implications. It is shown that the equations of the structural rheological model are capable of approximating the experimental data of dynamic measurements obtained for hydrogel samples at different deformation amplitudes.

Keywords: polymer hydrogel, viscoelasticity, loss moduli, storage moduli, structural rheological model

For citation.

Vekovishchev, M. P. & Kirsanov, E. A. (2025). Viscoelasticity of polymer hydrogel within the framework of the structural model. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2, pp.6–18. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-6-18>

Введение

В коллоидной химии [1] гелями называют дисперсные системы со сплошной пространственной сеткой, которая полностью заполнена жидкостью. Если жидкостью является вода, то систему называют гидрогелем, если роль частиц играют макромолекулы полимеров, то можно говорить о полимерных гидрогелях с коагуляционной структурой или химической сшивкой. Такое вещество в состоянии покоя ведёт себя как упругое твёрдое тело, при значительном внешнем воздействии гель деформируется и течёт.

Гелеобразование может осуществляться либо с использованием физического (нековалентного), либо химического (ковалентного) сшивания. Гидрогели представляют собой трёхмерные гидрофильные полимерные сетки, способные

удерживать большие объёмы воды за счёт наличия в структуре полимерной цепи гидрофильных групп, таких как $-\text{COOH}$, $-\text{SO}_3\text{H}$, $-\text{NH}_2$ и $-\text{OH}$. Молекулы воды в гидрогеле могут быть как связаны с сеткой, так и свободно перемещаться внутри неё. Гидрогели можно классифицировать по разным параметрам: процессу полимеризации, ионному заряду, физическим свойствам, сшивателям, виду использованных полимеров. По способу формирования сетки гидрогели можно разделить на физические и химические. Химические гидрогели образуются при возникновении ковалентных связей между полимерными цепями. Такие сетки формируются при полимеризации мономера в присутствии сшивателя или при сшивании водорастворимого полимера. В шитом состоянии химически сшитые гидрогели достигают равновесной степени набухания в водных растворах. В физических гидрогелях полимерные цепи удерживаются вместе за счёт молекулярных зацеплений и/или сил межмолекулярного взаимодействия, таких как ионные, водородные или гидрофобные взаимодействия. Как правило, физические гидрогели характеризуются высокой гетерогенностью, поскольку различные межмолекулярные взаимодействия вызывают образование неоднородностей [2].

Полимерный гидрогель состоит из большого количества воды и разреженной полимерной сети. Внутри гидрогеля вода представляет собой дисперсионную среду с низкой вязкостью. Разреженная полимерная сеть действует как энтропийная пружина, имеющая как ковалентные сшивки, так и физические контакты/зацепления. Полимерный гель, сшитый химически, ведёт себя как упругое тело (резина), не способное к течению. Гели с физическими контактами, способными к разрыву и восстановлению, способны к сдвиговому течению и обладают как упругими, так и вязкими свойствами.

Вязкоупругие свойства гидрогелей тесно связаны с их структурой и предоставляют полезную информацию для их дальнейшего использования, в частности в медицине, косметике, в качестве рабочего материала для 3D-принтеров и т. д. [2–5].

Реологические, в частности вязкоупругие, свойства гидрогелей исследуют в образцах, подготовленных двумя способами: свежие, только что изготовленные гидрогели; набухшие гидрогели, полученные из сухого порошка (ксерогеля) добавлением воды [6].

Будем рассматривать вязкоупругие характеристики гидрогелей в рамках структурных представлений [7; 8].

Аппроксимация реологических данных уравнениями структурной модели

В работе [6] экспериментально исследованы вязкоупругие свойства гидрогеля поливинилпирролидона и карбоксиметилцеллюлозы (ПВП-КМЦ). Основное внимание уделяется влиянию амплитуды деформации на динамические вязкоупругие свойства.

Гидрогели были приготовлены путём растворения поливинилпирролидона (PVP; в концентрации 0,2 % w/v), карбоксиметилцеллюлозы (СМС; 0,8 % w/v), полиэтиленгликоля (PEG; 1,0 % w/v), агара (2,0 % w/v) и глицерина (1,0 % w/v) в дистиллированной воде. В чашках Петри были получены мягкие, прозрачные круглые гидрогели, которые были названы «свежим гидрогелем PVP-СМС». Затем свежеприготовленные гидрогели выдерживают до высыхания при комнатной температуре (22–25°C) и хранят их для приготовления набухших образцов гидрогеля. Для этого сухие образцы замачивали в воде на 60 минут и получали «набухший» гидрогель (ПВП-КМЦ).

Вязкоупругие свойства гидрогелей исследовали с помощью реометра с параллельными пластинами (ARES, Rheometrics Scientific, США). Испытания проводились при температуре 28°C для получения частотной зависимости модуля накопления G' и модуля потерь G'' . Параллельная пластина имела диаметр 25 мм. Зазор между пластинами изменялся в зависимости от толщины образца (примерно от 1 мм до 3 мм для набухших гидрогелей и до 6 мм для свежих). Измерения проводились в режиме сдвиговых колебаний с диапазоном частот от $0,1 \text{ рад} \cdot \text{с}^{-1}$ до $100 \text{ рад} \cdot \text{с}^{-1}$ при двух различных амплитудах деформации: 1 % и 10 %. Последняя величина амплитуды считается наивысшим пределом деформации для измерений в области линейной вязкоупругой области для полимеров.

Экспериментальные результаты для свежего и набухшего гидрогеля (из работы [6]) показаны на рис. 1–7. Авторы [6] провели качественное описание реологических кривых, не касаясь структурных причин реологического поведения. Отмечено, что поведение гидрогеля может быть связано с разрывом физических связей (зацеплений) между макромолекулами полимеров.

Рассмотрим приведённые в [6] результаты измерений с точки зрения структурного подхода. Структурная реологическая модель [7] использована нами для описания результатов динамических измерений. Такое описание возможно, если допустить, что периодически изменяющаяся скорость сдвига влияет на структуру системы подобно постоянной скорости сдвига при стационарном течении. Эффективная скорость сдвига при сдвиговых осцилляциях может быть уподоблена скорости сдвига при сдвиговом течении одного направления. Тогда уравнения, полученные для стационарного сдвигового течения, могут быть преобразованы для осциллирующего сдвигового течения. В этом случае сдвиговые осцилляции рассматриваются как сдвиговое течение, периодически изменяющееся со временем по величине и направлению.

Уравнение для модуля потерь имеет вид:

$$G''^{1/2} = \frac{g' \omega^{1/2}}{\omega^{1/2} + \chi'} + \eta_{\infty}'^{1/2} \omega^{1/2}. \quad (1)$$

Первое слагаемое представляет собой структурную часть модуля потерь, обусловленную вязким поведением агрегатов частиц (ассоциатов макромолекул); второе слагаемое описывает часть модуля потерь, связанную с

вязким поведением совокупности отдельных частиц (отдельных макромолекул). Коэффициент g' показывает степень агрегации частиц. Коэффициент компактности χ' связан с плотностью частиц в агрегате (более рыхлые или более компактные агрегаты). Сплошная сетка частиц возникает при $\chi' = 0$ в пределе частоты $\omega \rightarrow 0$. Коэффициент $\eta_{\infty}^{1/2}$ описывает динамическую вязкость, возникающую за счёт обтекания отдельных частиц, и соответствует предельной вязкости при $\omega \rightarrow \infty$.

Уравнение для модуля накопления имеет вид:

$$G'^{1/2} = \frac{g'' \omega^{1/2}}{\omega^{1/2} + \chi''} + \eta_{\infty}^{1/2} \omega^{1/2}, \quad (2)$$

Первое слагаемое представляет собой структурную часть модуля накопления, обусловленную упругостью ассоциатов частиц (макромолекул); второе слагаемое описывает часть модуля накопления (или динамической упругости), связанную с упругостью отдельных частиц (макромолекул). Физический смысл коэффициентов в (1) и (2) одинаков, величина коэффициентов различна.

Если под действием гидродинамических сил возникают новые контакты или зацепления, то формируются новые агрегаты частиц или ассоциаты макромолекул. Этот процесс идёт одновременно с разрывом контактов или зацеплений.

Реологическое уравнение для этого режима осциллирующего течения имеет вид:

$$G''^{1/2} \approx g'_0 \omega^{1/2} + \Delta G''^{1/2}. \quad (3)$$

Коэффициент $\Delta G''^{1/2}$ может быть как положительным, так и отрицательным, кроме того, $g'_0 > \eta_{\infty}^{1/2}$.

Рассмотрим реологическое поведение свежего гидрогеля (ПВП-КМЦ) при амплитуде сдвиговых колебаний $\gamma_0 = 1\%$ (рис. 1).

Формы кривых $G'(\omega)$ и $G''(\omega)$ существенно отличаются. Аппроксимация уравнениями структурной модели производится на отдельных участках циклической частоты. Выбор этих участков проводится с помощью реологических кривых, построенных в корневых координатах (рис. 2). Коэффициенты реологических уравнений (1) и (2) приведены в табл. 1.

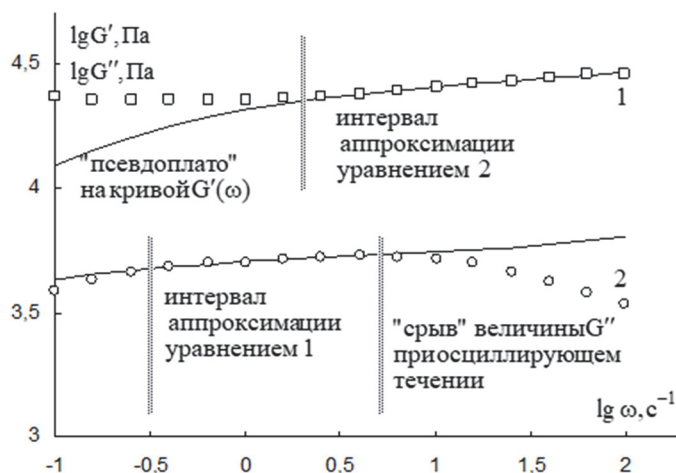


Рис. 1 / Fig. 1. Зависимость модуля накопления (1) и модуля потерь (2) свежего гидрогеля ПВП-КМЦ от циклической частоты в двойных логарифмических координатах при амплитуде деформации сдвига $\gamma_0 = 1 \%$ / Dependence of the storage modulus (1) and loss modulus (2) of fresh PVP-CMC hydrogel on the cyclic frequency in double logarithmic coordinates at a shear strain amplitude of $\gamma_0 = 1 \%$

Источник: [6].

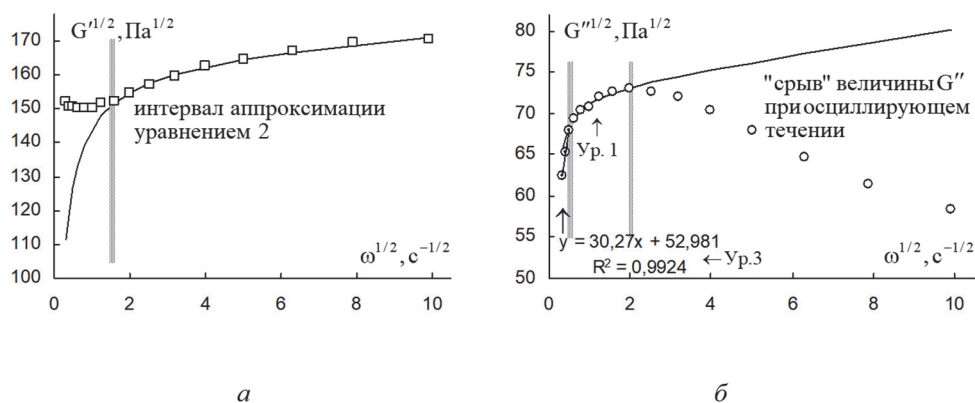


Рис. 2 / Fig. 2. Зависимость динамических модулей свежего гидрогеля ПВП-КМЦ от циклической частоты при амплитуде деформации сдвига $\gamma_0 = 1 \%$

в корневых координатах:

a – модуль накопления G' ; $б$ – модуль потерь G'' /

Dependence of dynamic moduli of fresh PVP-CMC hydrogel on cyclic frequency at shear deformation amplitude $\gamma_0 = 1 \%$ in root coordinates:

a – storage modulus G' ; $б$ – loss modulus G''

Источник: [6].

Можно выделить характерные участки на кривой $G'(\omega)$: «псевдоплато» при низких частотах и участок постепенного разрушения «упругой» структуры в районе высоких частот.

На кривой $G''(\omega)$ можно выделить следующие участки: небольшой интервал низких частот, где сосуществуют процессы разрушения и формирования «вязкой» структуры; участок, где происходит постепенное разрушение «вязкой» структуры; большой интервал частот, где происходит монотонное уменьшение величины G'' с частотой ω . Последнее явление будем называть «срывом» величины G'' при осциллирующем течении. По нашему мнению, явление «срыва» связано со сдвиговым расслоением образца, изменением профиля скоростей и возникновением слоя с низкой вязкостью и высокой скоростью вблизи движущегося элемента ячейки реометра.

Рассмотрим реологическое поведение свежего гидрогеля (ПВП-КМЦ) при амплитуде сдвиговых колебаний $\gamma_0 = 10\%$ (рис. 3).

Аппроксимация уравнениями структурной модели производится на отдельных участках циклической частоты. Выбор этих участков проводится с помощью реологических кривых, построенных в корневых координатах (рис. 4).

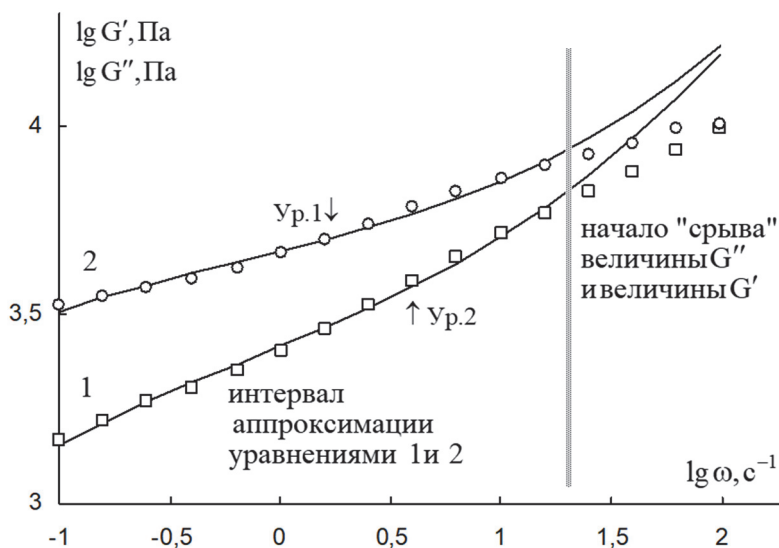


Рис. 3 / Fig. 3. Зависимость модуля накопления (1) и модуля потерь (2) свежего гидрогеля ПВП-КМЦ от циклической частоты в двойных логарифмических координатах при амплитуде деформации сдвига $\gamma_0 = 10\%$ / Dependence of the storage modulus (1) and loss modulus (2) of fresh PVP-CMC hydrogel on the cyclic frequency in double logarithmic coordinates at a shear strain amplitude of $\gamma_0 = 10\%$

Источник: [6].

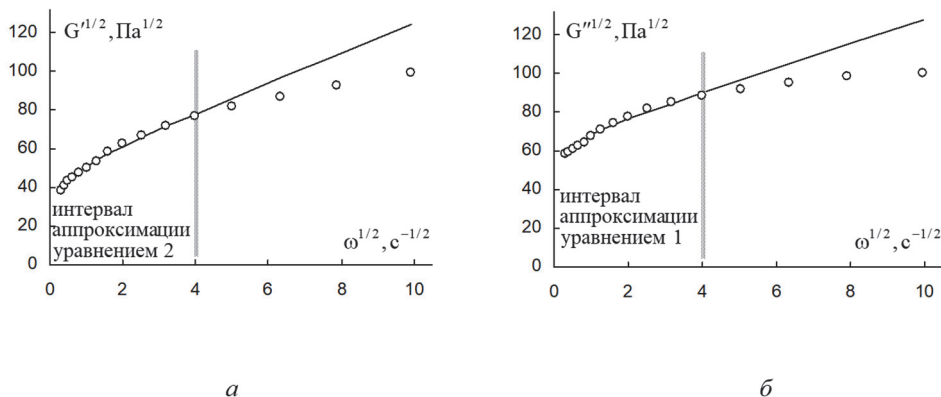


Рис. 4 / Fig. 4. Зависимость динамических модулей свежего гидрогеля ПВП-КМЦ от циклической частоты при амплитуде деформации сдвига $\gamma_0 = 10\%$ в корневых координатах:

a – модуль накопления G' ; *б* – модуль потерь G'' /

Dependence of dynamic moduli of fresh PVP-CMC hydrogel on cyclic frequency at shear deformation amplitude $\gamma_0 = 10\%$ in root coordinates:

a – storage modulus G' ; *б* – loss modulus G''

Источник: [6].

Выделим характерные участки на кривой $G'(\omega)$: участок постепенного разрушения «упругой» структуры в районе низких и средних частот; участок высоких частот, где начинается новый режим течения, возможно связанный с явлением «срыва» осциллирующего течения.

На кривой $G''(\omega)$ можно выделить следующие аналогичные интервалы частот: участок, где происходит постепенное разрушение «вязкой» структуры; интервал высоких частот, где начинается новый режим течения, возможно связанный со «срывом» течения.

Таблица 1 / Table 1

Коэффициенты реологических уравнений (1) и (2) для гидрогеля ПВП-КМЦ / Rheological equation coefficients (1) and (2) for PVP-CMC hydrogel

	$g', \text{Па}^{1/2}$	$\eta_{\infty}'^{1/2}, (\text{Па с})^{1/2}$	$\chi', \text{с}^{-1/2}$	$g'', \text{Па}^{1/2}$	$\eta_{\infty}''^{1/2}, (\text{Па с})^{1/2}$	$\chi'', \text{с}^{-1/2}$
Свеж. 1 %	72,94	0,744	0,037	164,9	0,873	0,154
10 %	66,06	6,280	0,064	48,68	7,72	0,120
Набух. 1 %	44,23	0,569	0,024	118,47	1,457	0,075
10 %	57,56	5,812	0,041	43,31	10,30	0,063

Источник: по данным авторов

Для свежего гидрогеля ПВП-КМЦ при амплитуде деформации сдвига $\gamma_0 = 1\%$ в области низких частот можно использовать уравнение (3) с коэффициентами:

$$\Delta G''^{1/2} = 52,98 \text{ Па}^{1/2}; g'_0 = 30,27 (\text{Па с})^{1/2}.$$

Судя по табл. 1, величина g'_0 значительно выше величины $\eta_\infty'^{1/2}$.

Рассмотрим реологическое поведение набухшего гидрогеля (ПВП-КМЦ) при амплитуде сдвиговых колебаний $\gamma_0 = 1\%$ (рис. 5). Легко видеть, что реологические кривые $G'(\omega)$ и $G''(\omega)$ по своему характеру сходны с типичными кривыми для растворов и расплавов полимеров.

Аппроксимация уравнениями структурной модели производится на отдельных участках циклической частоты. Выбор этих участков проводится с помощью реологических кривых, построенных в корневых координатах (рис. 6). Коэффициенты реологических уравнений (1) и (2) приведены в табл. 1.

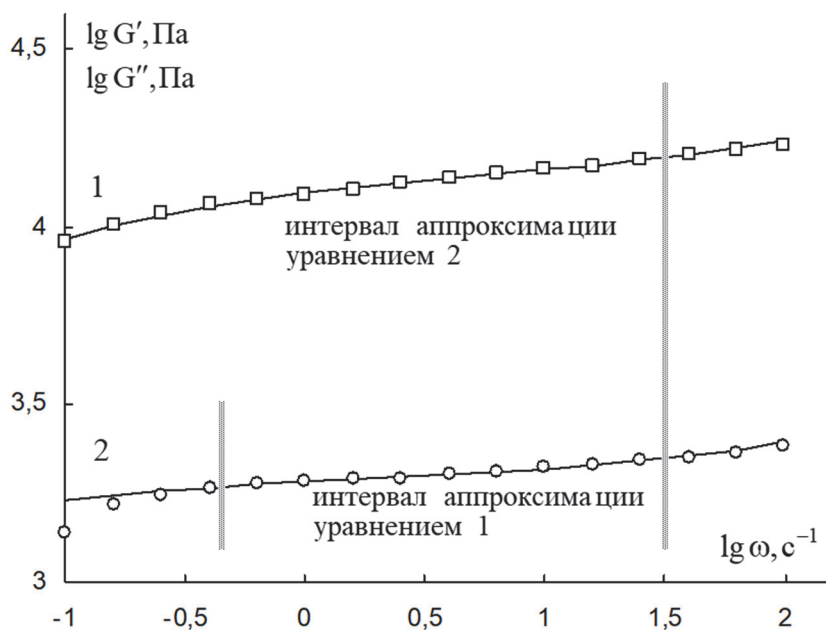


Рис. 5 / Fig. 5. Зависимость модуля накопления (1) и модуля потерь (2) набухшего гидрогеля ПВП-КМЦ от циклической частоты в двойных логарифмических координатах при амплитуде деформации сдвига $\gamma_0 = 1\%$ /

Dependence of the storage modulus (1) and loss modulus (2) of the swelled PVP-CMC hydrogel on the cyclic frequency in double logarithmic coordinates at a shear strain amplitude of $\gamma_0 = 1\%$

Источник: [6].

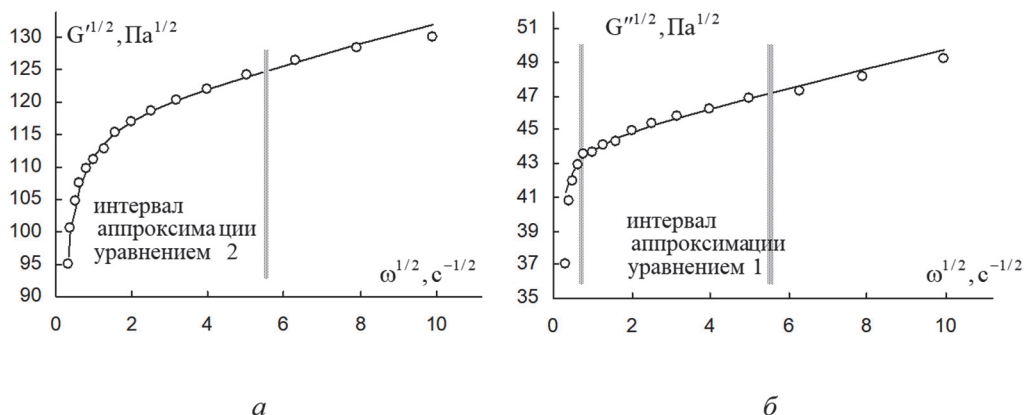


Рис. 6 / Fig. 6. Зависимость динамических модулей набухшего гидрогеля ПВП-КМЦ от циклической частоты при амплитуде деформации сдвига $\gamma_0 = 1\%$ в корневых координатах:

a – модуль накопления G' ; b – модуль потерь G'' /

Dependence of dynamic moduli of swelled PVP-CMC hydrogel on cyclic frequency at shear deformation amplitude $\gamma_0 = 1\%$ in root coordinates:

a – storage modulus G' ; b – loss modulus G''

Источник: [6].

Выделим характерные участки на кривой $G'(\omega)$: режим постепенного разрушения «упругой» структуры в районе низких и средних частот; район высоких частот, где возможно начинается «срыв» осциллирующего течения. На кривой $G''(\omega)$ можно выделить следующие интервалы частот: небольшой интервал низких частот, где величина G'' резко уменьшается с уменьшением частоты ω ; большой интервал средних частот, где происходит постепенное разрушение «вязкой» структуры; интервал высоких частот, где начинается новый режим течения, возможно связанный с частичным разрушением структуры образца.

Рассмотрим реологическое поведение набухшего гидрогеля (ПВП-КМЦ) при амплитуде сдвиговых колебаний $\gamma_0 = 10\%$ (рис. 7). Реологические кривые $G'(\omega)$ и $G''(\omega)$ на интервале средних частот аппроксимируются уравнениями (1) и (2). На малом интервале низких частот наблюдаются плато или снижение динамических модулей. На большом интервале высоких частот происходит снижение величины G' по отношению к экстраполированным значениям уравнения (2). Функция $G''(\omega)$ демонстрирует плато с постоянной величиной G'' , что характерно для явления срыва течения.

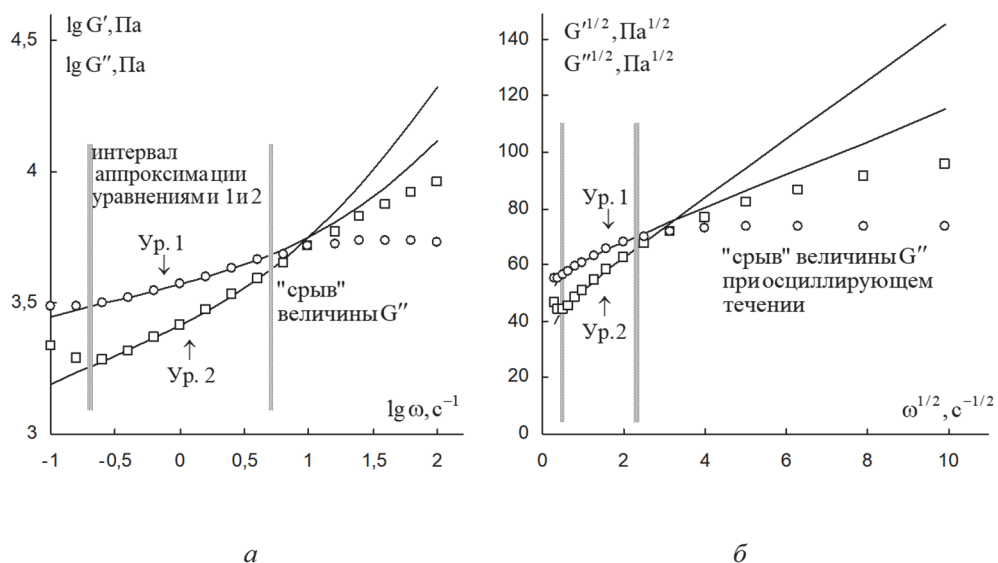


Рис. 7 / Fig. 7. Зависимость динамических модулей набухшего гидрогеля ПВП-КМЦ от циклической частоты при амплитуде деформации сдвига $\gamma_0 = 10\%$:

a – в двойных логарифмических координатах; b – в корневых координатах /
Dependence of dynamic moduli of swelled PVP-CMC hydrogel on cyclic frequency at shear deformation amplitude $\gamma_0 = 10\%$:
 a – in double logarithmic coordinates; b – in root coordinates

Источник: [6].

Кривые $G'(\omega)$ и $G''(\omega)$ имеют сложную форму и внешне различаются как для двух разных амплитуд деформации сдвига, так и для двух разных состояний гидрогеля (свежий и набухший). Тем не менее можно выделить отдельные интервалы частот, где имеются определённые режимы осциллирующего течения, связанные с состоянием структуры геля. На интервалах частот, где величины динамических модулей G' и G'' устойчиво увеличиваются с ростом ω происходит постепенное разрушение структуры, которое описывается уравнениями (1), (2) и (3). На интервалах частот, где значения модулей G' и G'' практически постоянны или снижаются с ростом частоты ω , вероятно, имеет место сдвиговое расслоение образца, т. е. скорость сдвига различна в разных участках образца гидрогеля.

Выводы

Вязкоупругое поведение гидрогеля ПВП-КМЦ рассмотрено в рамках структурной реологической модели. Реологические кривые $G'(\omega)$ и $G''(\omega)$ имеют характерные участки, которые можно аппроксимировать, используя уравнения структурной реологической модели. Изменение величины динамических модулей с частотой сдвиговых колебаний объясняется изменением структуры гидрогеля под действием осциллирующего течения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фролов Ю. Г. Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы: учебник для вузов; 3-е изд., стер., испр., перепеч. с изд. 1989 г. М.: ООО ТИД «Альянс», 2004. 464 с.
2. Антипова К. Г. Полимерные и композиционные гидрогелевые материалы для биомедицины с регулируемыми механическими характеристиками: дисс. ... канд. физ.-мат. наук. М., 2024. 157 с.
3. Rheological characterization of biological hydrogels in aqueous state / K. Alam, M. Iqbal, A. Hasan, N. Al-Maskari // *Journal of Applied Biotechnology Reports*. 2020. Vol. 7. No. 3. P. 172–176. DOI: 10.30491/JABR.2020.109994.
4. Молчанов В. С., Глухова С. А., Филиппова О. Е. Реологические свойства полисахаридных гидрогелей альгината с малыми добавками нанотрубок галлузита для экструзионной 3D-печати // *Вестник Московского университета. Серия 16: Биология*. 2023. Т. 78. № 3S. С. 63–68. DOI: 10.55959/MSU0137-0952-16-78-3S-11.
5. Tearing a hydrogel of complex rheology / Ruobing Bai, Baohong Chen, Jiawei Yang, Zhigang Suo // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2019. Vol. 125. P. 749–761. DOI: 10.1016/j.jmps.2019.01.017.
6. Effect of strain on viscoelastic behavior of fresh, swelled and mineralized PVP-CMC hydrogel / N. Saha, R. Vyroubal, R. Shah, K. Takeshi, P. Saha // *AIP Conference Proceedings*. 2013. Vol. 1526. Iss. 1. P. 301–309. DOI: 10.1063/1.4802624.
7. Кирсанов Е. А., Матвеев В. Н. Вязкость и упругость структурированных жидкостей: монография. М.: Техносфера, 2022. 284 с.
8. Вековищев М. П., Кирсанов Е. А. Неньютоновское течение структурированных систем. XXXVII. Вязкоупругость полимерного композита глина / нейлон-11 // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. 2023. Т. 23. №4. С. 67–75. DOI: 10.18083/LCAppl.2023.4.67.

REFERENCES

1. Frolov, Yu. G. (2004). *Course of Colloid Chemistry. Surface Phenomena and Disperse Systems*. Moscow: «Alliance» publ. (in Russ.).
2. Antipova, K. G. (2024). *Polymer and composite hydrogel materials for biomedicine with adjustable mechanical characteristics* [dissertation]. Moscow (in Russ.).
3. Alam, K., Iqbal, M., Hasan, A. & Al-Maskari, N. (2020). Rheological characterization of biological hydrogels in aqueous state. In: *Journal of Applied Biotechnology Reports*, 7 (3), 172–176. DOI: 10.30491/JABR.2020.109994.
4. Molchanov, V. S., Glukhov, S. A. & Philippova, O. E. (2023). Rheological behavior of polysaccharide hydrogels of alginate reinforced by small amount of halloysite nanotubes for extrusion 3D printing. In: *Herald of Moscow University. Series 16. Biology*, 78 (3S), 63–68 (in Russ.).
5. Ruobing, Bai, Baohong, Chen, Jiawei, Yang & Zhigang, Suo (2019). Tearing a hydrogel of complex rheology. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 125, 749–761.

6. Saha, N., Vyroubal, R., Shah, R., Takeshi, K. & Saha, P. (2013). Effect of strain on viscoelastic behavior of fresh, swelled and mineralized PVP-CMC hydrogel. In: *AIP Conference Proceedings*, 1526 (1), 301–309. DOI: 10.1063/1.4802624.
7. Kirsanov, E. A. & Matveenko, V. N. (2022). *Viscosity and elasticity of structured liquids*. Moscow: Technosphaera publ. (in Russ.).
8. Vekovishchev, M. P. & Kirsanov, E. A. (2023). Non-Newtonian flow of structured systems. XXXVII. Viscoelasticity of a clay/nylon-11 polymer composite. In: *Liquid Crystals and their Application*, 23 (4), 67–75 (in Russ.).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Вековищев Михаил Петрович (г. Коломна, Московская обл.) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики и химии Государственного социально-гуманитарного университета;

<https://orcid.org/0000-0001-9100-9526>; e-mail: mpv.71@mail.ru

Кирсанов Евгений Александрович (г. Коломна, Московская обл.) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики и химии Государственного социально-гуманитарного университета;

<https://orcid.org/0000-0003-3030-7989>; e-mail: Kirsanov47@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Mikhail P. Vekovishchev (Kolomna, Moscow region) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Physics and Chemistry, State University of Humanities and Social Studies;

<https://orcid.org/0000-0001-9100-9526>; e-mail: mpv.71@mail.ru

Evgeny A. Kirsanov (Kolomna, Moscow region) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Physics and Chemistry, State University of Humanities and Social Studies;

<https://orcid.org/0000-0003-3030-7989>; e-mail: Kirsanov47@mail.ru

Научная статья

УДК 530.1

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-2-19-26

ПРИНЦИП УСТОЙЧИВОСТИ В ФИЗИКЕ НЕИНЕРЦИАЛЬНЫХ СИСТЕМ ОТСЧЁТА

Камалов Т. Ф.

*Государственный университет просвещения, г. Москва, Российская Федерация
e-mail: timkamalov@gmail.com*

Поступила в редакцию 28.03.2025

После доработки 11.04.2025

Принята к публикации 21.04.2025

Аннотация

Цель: показать, что принцип наименьшего действия следует из требования устойчивости. Это означает возможность получения фундаментальных законов физики из устойчивости, т. к. они выводятся из принципа наименьшего действия.

Процедура и методы. Рассматривается вариационный принцип, который обобщает классический принцип наименьшего действия на любые системы отсчёта, включая случайные неинерциальные и требуя не только равенства нулю первой вариации функции действия, но и неотрицательности второй вариации функции действия.

Результаты. Из принципа наименьшего действия можно получить основные фундаментальные законы физики, поэтому можно утверждать, что они следуют из требования устойчивости.

Теоретическая и/или практическая значимость заключается в том, что аксиоматическое введение принципа устойчивости приводит к аксиоматике механики, электродинамики и других областей физики.

Ключевые слова: стохастическая физика, неинерциальная физика, принцип устойчивости, неустойчивость

Благодарности: автор благодарен профессору Беляеву В. В. за ценные обсуждения и интерес к этой работе.

Для цитирования.

Камалов Т. Ф. Принцип устойчивости в физике неинерциальных систем отсчёта // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 2. С.19–26. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-19-26>

Original research article

THE STABILITY PRINCIPLE IN PHYSICS OF NON-INERTIAL REFERENCE FRAMES

T. Kamalov

Federal State University of Education, Moscow, Russian Federation

e-mail: timkamalov@gmail.com

Received by the editorial office 28.03.2025

Revised by the author 11.04.2025

Accepted for publication 21.04.2025

Abstract

Aim is to demonstrate that the principle of least action follows from the stability requirement. This means that it is possible to obtain fundamental laws of physics from stability, since they are derived from the principle of least action.

Methodology. A variational principle is considered which generalizes the classical principle of least action to any reference frames, including random non-inertial ones, and requires not only the first variation of the action function to be zero, but also the second variation of the action function to be non-negative.

Results. The principle of least action can be used to obtain the main fundamental laws of physics, therefore it can be argued that they follow from the stability requirement.

Research implications. The significance of the study lies in the fact that the axiomatic introduction of the stability principle leads to the axiomatics of mechanics, electrodynamics and other areas of physics.

Keywords: stochastic physics, non-inertial physics, stability principle, instability

Acknowledgments: The author is grateful to Professor V. V. Belyaev for valuable discussions and interest in this work.

For citation:

Kamalov, T. F. (2025). The stability principle in physics of non-inertial reference frames. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2, pp.19–26. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-19-26>

Введение

В реальности инерциальные системы отсчёта не существуют. Всегда присутствуют малые воздействия случайных сил и полей, делающие систему отсчёта случайной неинерциальной стохастической. При использовании стохастических систем отсчёта и отказе от инерциальных базовых принципы и аксиомы физики подвергаются изменению.

Принцип устойчивости в физике

Учёт влияния случайных малых сил и полей расширяет уравнения классической физики, дополняя их переменными, обладающими недетерминированным, вероятностным поведением. В этом случае

рассматриваются не только устойчивые детерминированные траектории, но и неустойчивые [1], случайные, которые обычно считают погрешностью измерений в экспериментах при использовании классической физики.

Стохастические системы отсчёта (системы отсчёта со случайными силами инерции) позволяют описывать влияние случайных полей как на частицу, так и на наблюдателя. Переход от стохастической системы отсчёта к инерциальной приводит к тому, что свободная частица начинает случайным образом осциллировать, коррелируя с осцилляциями других свободных частиц.

Если рассматривать осцилляции с одной частотой, они выглядят когерентными. Преобразования инерциальных систем отсчёта представлены преобразованиями Галилея. Преобразования случайных неинерциальных систем отсчёта отличаются от преобразований Галилея на остаточные члены разложения Тейлора координаты $Q(t)$

$$Q = q(t) + \dot{q}(t)\tau + \Delta q(t),$$

$$T' = t,$$

где

$$\Delta q(t) = \sum_{k=2}^N (-1)^k \frac{1}{k!} \tau^k q^{(k)}(t).$$

В результате свободные частицы в инерциальных системах характеризуются неопределённостью в координате и импульсе, времени и энергии, равной остаточным членам разложения Тейлора.

Принцип устойчивости может не только обобщать, но и логически объяснять основные законы природы. Принцип устойчивости позволяет использовать устойчивость физических объектов и их состояний для объяснения и обобщения таких фундаментальных законов природы, как принцип наименьшего действия, устойчивость атомов, стационарность возможных траекторий и т. д. Он может быть использован как обобщённый закон, объясняющий такой фундаментальный закон природы, как принцип наименьшего действия. Поэтому его, очевидно, можно распространить и на все другие результаты, вытекающие из принципа наименьшего действия, такие как законы Ньютона, уравнения Эйлера-Лагранжа, уравнение Шредингера, законы распространения света и электромагнитных волн и т. д.

Условие устойчивости при расчёте механических траекторий предложено в работах Н. Г. Четаева, который считал «устойчивость, вероятно, по сути общим явлением, которое должно проявляться в основных законах природы» [2]. По мнению Н. Г. Четаева, устойчивость – это не просто случайность, а следствие воздействия на систему постоянно действующих бесконечно малых возмущений, которые, сколь бы малы они ни были, влияют на состояние механической системы. Развивая это явление и используя принцип

устойчивости в инерциальных системах отсчёта [1], перейдём к формулировке принципа устойчивости в стохастических системах отсчёта. Переход от стохастических систем отсчёта к инерциальным означает обнуление всех случайных переменных, описывающих неустойчивости в формализме высших производных Остроградского [3].

Принцип устойчивости

Существуют стохастические системы отсчёта, в которых устойчивая физическая система сохраняет свою энергию (в виде суммы квадратичных форм координат, скорости, ускорения и высших производных), если на неё не действуют диссипативные силы.

Математически это выражает, что энергия системы должна быть ограничена снизу, если первая вариация действия равна нулю ($\delta S=0$), а вторая вариация действия неотрицательна ($\delta^2 S > 0$).

Энергией устойчивых физических систем в стохастических системах отсчёта называется функция, которая сохраняется во времени [4]

$$E = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N a_k (q^{(k)})^2, \quad a_k > 0. \quad (1)$$

Действительно, первая вариация действия δS получается при варьировании q , \dot{q} , \ddot{q} :

$$\begin{aligned} \delta S &= \delta \int_{t_1}^{t_2} L_r(q, \dot{q}, \ddot{q}, \dots, \dot{q}^{(n)}, \dots) dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L_r}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L_r}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} dt + \frac{\partial L_r}{\partial \ddot{q}} \delta \ddot{q} + \dots \right) dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_{n=0}^N (-1)^n \frac{d^n}{dt^n} \frac{\partial L_r}{\partial q^{(n)}} \delta q^{(n)} dt = 0 \end{aligned}$$

Здесь, интегрируя по частям члены с $\delta \dot{q}$ и $\delta \ddot{q}$, получаем уравнения Эйлера-Остроградского [5]:

$$\sum_{n=0}^N (-1)^n \frac{d^n}{dt^n} \frac{\partial L_r}{\partial q^{(n)}} \delta q^{(n)} dt = 0, \quad (2)$$

Или

$$\frac{\partial L_r}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L_r}{\partial \dot{q}} + \frac{d^2}{dt^2} \frac{\partial L_r}{\partial \ddot{q}} - \frac{d^3}{dt^3} \frac{\partial L_r}{\partial \dot{q}^{(3)}} + \dots + (-1)^n \frac{d^n}{dt^n} \frac{\partial L_r}{\partial q^{(n)}} + \dots = 0 \quad (3)$$

Вторая вариация равна

$$\delta^2 S = \sum_{k=0}^N a_k \int (\delta q^{(k)})^2 dt > 0. \quad (3)$$

На экстремальных (где первая вариация $\delta S=0$) вторая вариация определяет устойчивость траектории. Если $\delta^2 S > 0$ для всех допустимых вариаций, то экстремаль соответствует минимуму действия.

Если ограничиться только вторыми производными обобщённых координат по времени, то функцию действия перепишем в виде

$$S(q, \dot{q}, \ddot{q}) = \int_{t_1}^{t_2} L_r(q, \dot{q}, \ddot{q}) dt \quad (5)$$

Обобщённые импульсы для систем с высшими производными имеют вид:

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \ddot{q}} \right), \quad p_2 = \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}}, \quad (6)$$

а Гамильтониан принимает форму:

$$H = p_1 \dot{q} + p_2 \ddot{q} - L \quad (7)$$

Из закона сохранения энергии должно следовать:

$$\frac{dH}{dt} = 0 \quad (8)$$

(если L не зависит явно от времени).

Тогда для квадратичных форм лагранжиана энергия устойчивой системы в стохастических системах отсчёта примет вид [5]:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N \mathbf{a}_k (\mathbf{q}^{(k)})^2, \quad \mathbf{a}_k > 0,$$

Отсюда можно сформулировать следующее утверждение [6]:

Динамическая система устойчива в стохастических системах отсчёта и сохраняет полную энергию – поступательную, вращательную, колебательную, электромагнитную и гравитационную (выраженную в виде квадратичных форм координат, скоростей и высших производных), – если на неё не действуют диссипативные силы.

Из равенства нулю первой вариации функции действия получаем уравнения Эйлера-Лагранжа для стохастических систем отсчёта в форме Остроградского.

При измерении случайных неинерционных сил возникают погрешности. Поэтому идея Ньютона $F - ma + f = 0$ об описании физических систем дифференциальными уравнениями второго порядка с учётом принципа д'Аламбера со случайной силой инерции f выражает зависимость от высших производных координат по времени. Здесь сила f случайная даёт ошибку измерений и при усреднении равна нулю $\langle f \rangle = 0$. Однако описание квантово-механического поведения микрообъектов выражается распределениями вероятностей, и, отбрасывая переменные с высшими производными, мы перейдём ко второму закону Ньютона. Квантово-механическая теория описывает корреляции микрообъектов, и значения случайных неинерционных сил f для различных микрообъектов будут коррелированными. Следовательно, для описания физических систем в стохастических системах отсчёта необходимы уравнения с высшими производными в виде формализма Остроградского и (3) перепишем в виде [7–12]. Переход от стохастических систем отсчёта к инерциальным системам отсчёта означает, что усреднение по всем случайным переменным равняется нулю с получением второго закона Ньютона из уравнения динамики в стохастической системе отсчёта

$$F - ma + \tau m \dot{a} - \frac{1}{2!} \tau^2 m a^{(2)} + \dots + \frac{(-1)^n}{n!} \tau^n m a^{(n)} + \dots = 0 \quad (9)$$

$$\dot{a}(t_0) = 0, \ddot{a}(t_0) = 0, \dots, a^{(n)}(t_0) = 0, \dots$$

$\tau = \hbar/2mc^2$ – временной интервал усреднения, a – ускорение, t_0 – момент времени достижения траектории устойчивости.

Нечётные производные описывают диссипативные силы и могут быть исключены при рассмотрении в отсутствии диссипативных сил. Второй закон Ньютона $F - ma = 0$ – это дифференциальное уравнение второго порядка, описывающее устойчивую динамику в инерциальных системах отсчёта.

Заключение

Теоретическую физику можно построить исходя не из принципа наименьшего действия, а из устойчивости. Это, в свою очередь, позволяет вывести основные законы различных разделов физики. Принцип устойчивости устраняет необходимость одновременно вводить несколько аксиом в физике. Это относится к механике, электродинамике, теории относительности, квантовой физике и другим областям.

ЛИТЕРАТУРА

1. Камалов Т. Ф. Принцип устойчивости // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2022. № 2. С. 51–55. DOI: 10.18384/2310-7251-2022-2-51-55.
2. Чегаев Н. Г. Об устойчивых траекториях динамики // Ученые записки Казанского университета. 1931. Т. 91. Кн. 4. С. 3–8.
3. Woodard R. P. Avoiding Dark Energy with 1/R Modifications of Gravity // The Invisible Universe: Dark Matter and Dark Energy / ed. L. Papantonopoulos. Berlin: Springer, 2007. P. 403–433 (Series: Lecture Notes in Physics, 720). DOI: 10.1007/978-3-540-71013-4_14.
4. Wheeler J. T. Not-so-classical mechanics: unexpected symmetries of classical motion // Canadian Journal of Physics. 2005. Vol. 83. No. 2. P. 91–138. DOI: 10.1139/p05-003.
5. El-Nabulsi R. A. Non-Standard Non-Local-in-Time Lagrangians in Classical Mechanics // Qualitative Theory of Dynamical Systems. 2014. Vol. 13. P. 149–160. DOI: 10.1007/s12346-014-0110-3.
6. Newton I. Philosophiae naturalis principia mathematica. London: Jussu Societatis Regiae ac typis Josephi Streater. Prostat apud plures bibliopolas, 1687. 516 p.
7. Kamalov T. F. Quantum correction for Newton's Law of Motion // Symmetry. 2020. Vol. 12 (1). Article no. 63. DOI: 10.3390/sym12010063.
8. Kamalov T. F. Quantum extension for Newton's law of motion // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1251: Advances in Fundamental Physics: Prelude to Paradigm Shift, 11th International Symposium Honoring Noted Mathematical Physicist Jean-Pierre Vigiér (6–9 August 2018, Liege, Belgium). Article no. 012022. DOI: 10.1088/1742-6596/1251/1/012022.
9. Kamalov T. F. Instability states and Ostrogradsky formalism // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 1051: XX International Meeting “Physical Interpretations of

- Relativity Theory 2017” (3–6 July 2017, Moscow, Russian Federation). Article no. 012033. DOI: 10.1088/1742-6596/1051/1/012033.
10. Kamalov T. F. Instability Criterion and Uncertainty Relation // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. Vol. 1557: XXI International Meeting “Physical Interpretations of Relativity Theory 2019” (1-5 July 2019, Moscow, Russian Federation). Article no. 012003. DOI: 10.1088/1742-6596/1557/1/012003.
 11. Kamalov T. F. Physics of Non-Inertial Reference Frames // *American Institute of Physics Conference Proceedings*. 2010. Vol. 1316. Iss. 1. P. 455–459. DOI: 10.1063/1.3536452.
 12. Kamalov T. F., Kamalov Yu. T. Physics of Non-Inertial Reference Frames, conclusions and consequences // *Journal of Physics: Conference Series*. 2025. Vol. 3017: Eleventh International Workshop on Decoherence, Information, Complexity and Entropy (DICE 2024). Article no. 012020. DOI: 10.1088/1742-6596/3017/1/012020.

REFERENCES

1. Kamalov, T. F. (2022). Stability principle. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2, 51–55. DOI: 10.18384/2310-7251-2022-2-51-55 (in Russ.).
2. Chetaev, N. G. (1931). On stable trajectories of dynamics. In: *Scientific Notes of Kazan University*, 91 (4), 3–8 (in Russ.).
3. Woodard, R. P. (2007). Avoiding Dark Energy with 1/R Modifications of Gravity. In: Papantonopoulos, L. ed. *The Invisible Universe: Dark Matter and Dark Energy*. Berlin: Springer, pp. 403–433 (Series: Lecture Notes in Physics, 720). DOI: 10.1007/978-3-540-71013-4_14.
4. Wheeler, J. T. (2005). Not-so-classical mechanics: unexpected symmetries of classical motion. In: *Canadian Journal of Physics*, 83 (2), 91–138. DOI: 10.1139/p05-003.
5. El-Nabulsi, R. A. (2014). Non-Standard Non-Local-in-Time Lagrangians in Classical Mechanics. In: *Qualitative Theory of Dynamical Systems*, 13, 149–160. DOI: 10.1007/s12346-014-0110-3.
6. Newton, I. (1687). *Philosophiae naturalis principia mathematica*. London: Jussu Societatis Regiae ac typis Josephi Streater. Prostat apud plures bibliopolas.
7. Kamalov, T. F. (2020). Quantum correction for Newton's Law of Motion. In: *Symmetry*, 12 (1), article no. 63. DOI: 10.3390/sym12010063.
8. Kamalov, T. F. (2020). Quantum extension for Newton's law of motion. In: *Journal of Physics: Conference Series*, 1251, 012022. DOI: 10.1088/1742-6596/1251/1/012022.
9. Kamalov, T. F. (2018). Instability states and Ostrogradsky formalism. In: *Journal of Physics: Conference Series*, 1051, 012033. DOI: 10.1088/1742-6596/1051/1/012033.
10. Kamalov, T. F. (2020). Instability Criterion and Uncertainty Relation. In: *Journal of Physics: Conference Series*, 1557, 012003. DOI: 10.1088/1742-6596/1557/1/012003.
11. Kamalov, T. F. (2010). Physics of Non-Inertial Reference Frames. In: *AIP Conference Proceedings*, 1316 (1), 455–459. DOI: 10.1063/1.3536452.

12. Kamalov, T. F. & Kamalov, Yu. T. (2025). Physics of Non-Inertial Reference Frames, conclusions and consequences. In: *Journal of Physics: Conference Series*, 3017, 012020. DOI: 10.1088/1742-6596/3017/1/012020.
-

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Камалов Тимур Фянович (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры фундаментальной физики и нанотехнологий Государственного университета просвещения;

<https://orcid.org/0000-0002-4349-4747>; e-mail: timkamalov@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Timur F. Kamalov (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education;

<https://orcid.org/0000-0002-4349-4747>; e-mail: timkamalov@gmail.com

Научная статья

УДК 538.913

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-2-27-46

МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОГО БЛОКА (001) Ni ДЛЯ ЗАДАЧ ИОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ: РЕЛАКСАЦИЯ И ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ

Мусин А. И.

Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», г. Москва, Российская Федерация

*Вятский государственный университет, г. Киров, Российская Федерация
e-mail: ai.musin@physics.msu.ru*

Поступила в редакцию 19.05.2025

Принята к публикации 23.05.2025

Аннотация

Цель: создать молекулярно-динамическую модель атомного блока (001) Ni, которую можно использовать при исследовании распыления.

Процедура и методы. Используется метод молекулярной динамики, метод Бокса-Мюллера для генерации случайных величин из нормального распределения, метод погруженного атома, метод сопряжённых градиентов Флетчера-Ривса, метод аппроксимации параболой и метод золотого сечения для поиска минимума функции, метод Верле для скоростей.

Результаты. Создана программа для молекулярно-динамического моделирования с предварительной релаксацией атомного блока. Для блоков разных размеров рассчитаны постоянная решётки и поверхностная энергия связи. Показана корректность модели.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты могут быть использованы другими исследователями при разработке похожих моделей. Кроме того, созданная в работе модель будет нами использоваться на практике в будущих работах для исследования эмиссии атомов при распылении с грани (001) Ni.

Ключевые слова: молекулярная динамика, релаксация системы, метод сопряжённых градиентов, многочастичный потенциал, постоянная решётки, поверхностная энергия связи

Благодарности и источники финансирования. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М. В. Ломоносова. Автор выражает благодарность доценту В. Н. Самойлову за полезные советы и обсуждение.

Для цитирования.

Мусин А. И. Моделирование атомного блока (001) Ni для задач ионного распыления: релаксация и основные параметры // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 2. С.27–46. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-27-46>

Original research article

SIMULATION OF ATOMIC BLOCK (001) Ni FOR ION SPUTTERING PROBLEMS: RELAXATION AND MAIN PARAMETERS

A. Musin

Moscow State University of Technology "STANKIN", Moscow, Russian Federation

Vyatka State University, Kirov, Russian Federation

e-mail: ai.musin@physics.msu.ru

Received by the editorial office 19.05.2025

Accepted for publication 23.05.2025

Abstract

Aim is to create a molecular dynamics model of the (001) Ni atomic block that can be used to study sputtering.

Methodology. The molecular dynamics method, the Box-Muller method to generate random numbers from normal distribution, the embedded atom method, the Fletcher-Reeves conjugate gradient method, the parabola approximation and the golden section methods to find the minimum of a function, and the Velocity Verlet method are used.

Results. A program for molecular dynamics modeling with preliminary relaxation of the atomic block has been created. The lattice constant and surface binding energy were calculated for blocks of different sizes. The correctness of the model has been shown.

Research implications. The results can be used by other researchers in developing similar models. In addition, the model created in the work will be used in practice in our future works to study the ejection of atoms during sputtering from the (001) Ni face.

Keywords: molecular dynamics, system relaxation, conjugate gradient method, many-body potential, lattice constant, surface binding energy

Acknowledgements. The research is carried out using the equipment of the shared research facilities of HPC computing resources at Lomonosov Moscow State University. The author is grateful to Associate Professor V. N. Samoilov for useful advices and discussion.

For citation.

Musin, A. I. (2025). Simulation of atomic block (001) Ni for ion sputtering problems: relaxation and main parameters. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2, pp.27–46. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-27-46>

Введение

Сразу в нескольких разделах физики, таких как физика конденсированного состояния, физическая электроника, математическая физика и других, уделяется внимание теме взаимодействия ускоренного пучка ионов с поверхностью твёрдого тела. В процессе такого взаимодействия часть частиц бомбардируемой мишени покидает поверхность в виде нейтральных атомов (*ионное распыление*) или вторичных ионов (*вторичная ионная эмиссия*). Эти явления представляют большой интерес для методов элементного и структурного анализа поверхности (например, метода вторичной ионной масс-спектрометрии [1]), для

модификации поверхности [2] и травления [3], напыления тонких плёнок [4] и даже астрофизических исследований [5].

Математическое моделирование играет важную роль для изучения ионного распыления, ведь развитие аналитического подхода сталкивается с трудностью решения задачи многих тел. В некоторых статьях и программных пакетах (например, TrimSP) используется *приближение парных столкновений* (англ. BCA – Binary Collision Approximation). Тем не менее более корректно описывать систему с множеством атомных взаимодействий *методом молекулярной динамики* (МД).

Особый интерес вызывают работы, в которых не просто рассчитываются те или иные параметры, например, коэффициент распыления, а делается попытка выявить физические механизмы формирования особенностей распределения распылённых атомов по углам и энергии. Так, в работах [6; 7] рассматривалось действие *поверхностных механизмов* на финальной стадии распыления монокристалла, то есть *эмиссии с поверхности*.

Общая идея такова, что весь монокристалл заменяется на несколько атомов верхнего слоя, для грани (001) минимальный фрагмент поверхности – это эмитируемый атом и 4 атома ближайшего окружения. После этого эмитируемому атому задаются различные начальные энергии E_0 и начальные направления вылета, характеризующиеся полярным углом ϑ_0 и азимутальным углом φ_0 в соответствии с начальной функцией распределения $F_0(E_0, \cos \vartheta_0)$, в классической теории распыления П. Зигмунда $F_0 \sim \cos \vartheta_0 / E_0^2$ [8; 9]. Далее выполняется численное интегрирование уравнений движения с парным потенциалом Борна-Майера $U(r) = A \cdot \exp(-r/b)$, а затем учитывается поверхностная энергия связи E_b при прохождении плоского потенциального барьера.

Несмотря на то, что такая модель очень проста, она воспроизводит экспериментальные особенности распределений распылённых атомов, такие как *пятна Венеры* (максимумы в угловом распределении распылённых атомов), немонотонный сдвиг максимума полярного углового распределения распылённых атомов с увеличением энергии наблюдения и некоторые другие. В [6; 7] и других работах показывается, что вклад надповерхностного рассеяния атома при эмиссии с поверхности монокристалла является определяющим для формирования особенностей распределений распылённых атомов.

Тем не менее для полноценного анализа поверхностных механизмов желательно сравнение результатов, полученных в рамках упрощённой модели, с результатами молекулярно-динамического моделирования, приближенными к реальному эксперименту. Отчасти это было сделано в недавних работах [10; 11], в которых использовалась МД-модель Г. В. Корнича и Г. Бетца [12] с падением ионов Ag (энергия 200 эВ) на поверхность атомного блока (001) Ni. В рамках этой модели взаимодействие Ni-Ni описывается не парными потенциалами, а многочастичным потенциалом Аккланда [13] в рамках *метода погруженного атома* (англ. EAM – Embedding Atom Method).

В настоящей работе было решено создать собственную МД-модель для проверки и сравнительного анализа эффектов, найденных в предыдущих работах, в том числе [6; 7; 10; 11]. В статье мы опишем первую часть – релаксацию и моделирование динамики самого атомного блока (001) Ni, обоснуем применяемые подходы и представим полученные результаты.

Модель расчёта

Инструментарий. Для моделирования атомного блока (001) Ni была создана программа на языке Fortran, который считается оптимальным для научных вычислений. Код был создан автором самостоятельно. В процессе разработки использовалась большая языковая модель (LLM) DeepSeek-V3 для написания отдельных частей кода в качестве «черновых заготовок» и частично – для поиска и исправления ошибок (в режиме DeepThink).

Для расчётов использовались ресурсы как локального компьютера, так и суперкомпьютера «Ломоносов-2» Московского государственного университета [14]. Траектории атомов записывались в файл формата XYZ и визуализировались в программе VMD [15].

Инициализация атомной системы. Кристаллический никель имеет ГЦК-решётку, которая состоит из элементарных ячеек в форме куба, атомы располагаются в вершинах куба и в центрах граней. Из этого следует, что на одну ячейку приходится 8 атомов с весом $1/8$ и 6 атомов с весом $1/2$, то есть всего 4 атома. Поэтому возьмём внутри куба со стороной 1 атомы с координатами $(0, 0, 0)$, $(0.5, 0.5, 0)$, $(0.5, 0, 0.5)$ и $(0, 0.5, 0.5)$ и транслируем по трём осям в количестве N_x, N_y, N_z с последующим умножением координат на размерную постоянную a (константа решётки). Тогда полное количество атомов в блоке $N = 4N_xN_yN_z$. Начальное значение постоянной решётки бралось равным 3.5 \AA .

Ось Oz направляется от поверхности (которой соответствует плоскость вблизи $z = 0$) вглубь кристаллического блока, и если какой-то атом будет вылетать с поверхности, он будет двигаться в сторону, противоположную оси Oz . Атомы, находящиеся в элементарных ячейках вблизи плоскости $z = N_z a$ («дно»), получают статус «фиксированных». Фиксация нижних атомных слоёв позволяет компенсировать отсутствие более глубоких слоёв кристалла, предотвращая нефизичные смещения всей системы и артефакты, связанные со свободной поверхностью (неконтролируемое расширение или сжатие).

По бокам (оси Ox, Oy) применялись периодические граничные условия, которые на языке Fortran очень просто реализуются с помощью функции *modulo*. Так, после сдвига атома и расчёта его новых координат x и y , которые могут выйти за пределы моделируемого блока, то есть интервалы $0 < x < N_x a, 0 < y < N_y a$, выполняются операторы присваивания

$$x = \text{modulo}(x, N_x a),$$

$$y = \text{modulo}(y, N_y a),$$

«перебрасывающие» атом с одной грани блока на другую.

Начальные проекции скоростей атомов (исключая фиксированные) на координатные оси выбирались исходя из заданной температуры T , их распределение считалось максвелловским, т. е. нормальным с нулевым средним и дисперсией

$$\sigma^2 = k_B T / m.$$

Генерация таких случайных величин осуществлялась с помощью метода Бокса-Мюллера, в рамках которого генерируются псевдослучайные числа r и φ из равномерного распределения $\sim U(0; 1)$, а потом вычисляется число $u \sim N(0; 1)$:

$$u = \cos(2\pi\varphi) \sqrt{-2 \ln r}.$$

Для получения проекции скорости число u нужно домножить на σ . При таком подходе скорость центра масс – также случайная величина, поэтому после генерации скоростей их нужно скорректировать на эту величину, для предотвращения дрейфа системы.

Все атомы системы рассортировываются по кубическим ячейкам размера $(r_{\text{cut}} + r_{\text{skin}})$, где $r_{\text{cut}} = 6 \text{ \AA}$ – радиус обрезания потенциала, $r_{\text{skin}} = 1 \text{ \AA}$ – размер буферной зоны. Номера атомов, попавших в одну ячейку, располагаются в связанном списке. При смещении атома более чем на r_{skin} списки обновляются. Это позволяет оптимизировать расчёты и снизить сложность вычислений.

В программе используется следующая система единиц измерения: ангстрем (\AA) для измерения расстояний, электронвольт (эВ) для энергий и атомные единицы (а.е.м.) для масс атомов. В такой системе единичное время составляет 7.2 фс.

Потенциал взаимодействия. Для современных молекулярно-динамических расчётов металлов обычно используются многочастичные потенциалы. Особенно популярен метод погруженного атома (EAM), упомянутый выше. В рамках этого метода считается, что потенциальная энергия атома i равна

$$U_i = F(\rho_i) + \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}),$$

где F – функция погружения, ϕ – парный потенциал взаимодействия, r_{ij} – расстояние между атомами i и j , а электронная плотность рассчитывается по формуле

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

Первое слагаемое в потенциальной энергии как раз отвечает за многочастичное взаимодействие, вклад которого в металлах довольно ощутим.

Разными авторами предлагаются различные выражения для функций F , f и ϕ . В потенциале Аккланда, который использовался нами ранее в готовой модели [10; 11], функция погружения $F(\rho) = -\rho^{1/2}$, а f и ϕ задаются кубическими сплайнами. В настоящей работе мы решили выбрать более современный потенциал Чжоу-Джонсона-Уодли [16], в котором

$$\phi(r) = \frac{A \exp[-\alpha(r/r_e - 1)]}{1 + (r/r_e - \kappa)^{20}} - \frac{B \exp[-\beta(r/r_e - 1)]}{1 + (r/r_e - \lambda)^{20}},$$

$$f(r) = \frac{f_e \exp[-\beta(r/r_e - 1)]}{1 + (r/r_e - \lambda)^{20}},$$

$$F(\rho) = \begin{cases} \sum_{i=0}^3 F_{ni} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1\right)^i, & \rho < \rho_n = 0.85\rho_e \\ \sum_{i=0}^3 F_i \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1\right)^i, & \rho_n \leq \rho < \rho_0 \\ F_e \left[1 - \ln\left(\frac{\rho}{\rho_s}\right)\right] \left(\frac{\rho}{\rho_s}\right)^\eta, & \rho \geq \rho_0 \end{cases}.$$

Продифференцируем потенциальную энергию и получим выражение для силы, действующей на атом i со стороны атома j :

$$\mathbf{F}_{ij} = -\{[F'(\rho_i) + F'(\rho_j)]f'(r_{ij}) + \phi'(r_{ij})\} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}}$$

При $r > r_{\text{cut}}$ значение парного потенциала $\phi(r)$ очень мало, однако для корректности интегрирования и отсутствия артефактов необходимо сделать плавное обрезание. В нашем случае потенциал $\phi(r)$ просто домножался на сглаживающую функцию

$$S(r) = \begin{cases} 1, & r < r_{\text{cut0}} \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \frac{\pi(r - r_{\text{cut0}})}{r_{\text{cut}} - r_{\text{cut0}}}\right], & r_{\text{cut0}} \leq r < r_{\text{cut}} \\ 0, & r \geq r_{\text{cut}} \end{cases}$$

Радиус начала обрезания выбирался равным $r_{\text{cut0}} = 5.5 \text{ \AA}$. Такой подход позволяет сохранить непрерывность потенциала и его производной.

Известно, что для описания рассеяния атомов друг на друге ЕАМ потенциалы не подходят – они создавались для моделирования объёмных свойств металлов путём калибровки под равновесные параметры (энергии связи, параметры решётки, упругие константы и так далее). Сильные сближения атомов ($r < 1 \text{ \AA}$) очень далеки от равновесных состояний, при таких расстояниях электронные облака перекрываются, и энергия парного взаимодействия описывается некорректно.

Для решения проблемы на малых расстояниях, как и в [10; 11], мы воспользовались универсальным потенциалом Зиглера-Бирсака-Литтмарка (ZBL) [17]:

$$\phi_{\text{ZBL}}(r) = \alpha_e \hbar c \frac{Z^2}{r} \chi\left(\frac{r}{a_s}\right),$$

где $\alpha_e = 1/137$ – постоянная тонкой структуры, $\hbar c = 1973.27 \text{ эВ}\cdot\text{\AA}$, функция и радиус экранирования задаются выражениями

$$\chi(z) = 0.1818e^{-3.2000z} + 0.5099e^{-0.9423z} + 0.2802e^{-0.4029z} + 0.02817e^{-0.2016z},$$

$$a_s = \frac{0.88534a_B}{2Z^{0.23}},$$

a_B – первый борковский радиус. Для сшивки потенциала ZBL и парной части ЕАМ на участке от $r_{sp1} = 0.5 \text{ \AA}$ до $r_{sp2} = 1.5 \text{ \AA}$ мы использовали экспоненциально-кубический сплайн

$$\phi_{sp}(r) = \exp \left[B_0 + B_1(r - r_{sp1}) + B_2(r - r_{sp1})^2 + B_3(r - r_{sp1})^3 \right],$$

который эквивалентен сплайну из [10], но более удобен из практических соображений – легче решаются уравнения на коэффициенты B , которые получаются из условий непрерывности потенциала и его производной.

Релаксация блока. Для получения стабильных и физически осмысленных результатов заданный блок нужно отрелаксировать, чтобы убрать артефакты начальной конфигурации, иначе в решётке могут возникнуть скачки энергии и неустойчивые состояния с напряжениями.

Для минимизации потенциальной энергии $U(q)$ как функции вектора координат всех подвижных атомов q , размерность которого равна числу степеней свободы s , применялся очень распространённый метод сопряжённых градиентов Флетчера-Ривса [18], в котором циклически выполняются следующие шаги.

1. *Первоначальное направление спуска* (шаг $n = 0$). В качестве такового берётся антиградиент $g_0 = -\nabla U(q_0)$, или, что то же самое, s -мерный вектор сил, где q_0 задаёт начальную конфигурацию.
2. *Линейный поиск.* Решается задача линейного поиска для вычисления шага α_n в выбранном направлении, то есть ищется минимум функции $U(q_n + \alpha_n g_n)$ по α_n , где q_n – конфигурация атомов на n -ом шаге, g_n – направление спуска на n -ом шаге.
3. *Шаг спуска.* Вычисляется новая конфигурация: $q_{n+1} = q_n + \alpha_n g_n$.
4. *Новое направление спуска:* $g_{n+1} = -\nabla U(q_{n+1}) + \beta_n g_n$, где коэффициент вычисляется по формуле $\beta_n = \|\nabla U(q_{n+1})\|^2 / \|\nabla U(q_n)\|^2$, $\|\cdot\|$ обозначает евклидову норму s -мерного вектора. Затем возвращаемся к п. 2 до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность.

При реализации «дно» блока из фиксированных атомов остаётся на месте, что приводит к неустойчивости найденного равновесия. Эта неустойчивость связана с неточным заданием постоянной решётки a как масштабного параметра системы. Значение a зависит от типа потенциала, размеров блока и от расстояния до поверхности. Поэтому дополнительно необходимо провести оптимизацию по отношению к сжатию-растяжению всей системы в целом, то есть искать минимум функции $U(aq^*)$ по параметру решётки a , где q^* – безразмерные координаты всех атомов (в единицах a), с учётом закреплённых.

Результаты и обсуждение

Поиск энергетического равновесия. Мы запускали релаксацию для 11 атомных блоков различных размеров. Оказалось, что метод Флетчера-Ривса для поиска минимума энергии очень эффективен: количество шагов для достижения

минимума с заданной точностью обычно не превышает 50. Сравнение с методом обычного градиентного спуска (в котором, фактически, $\beta_n \equiv 0$) показало, что там, где метод Флетчера-Ривса достигал минимума с точностью до 10^{-5} эВ/Å (то есть максимальная из всех сил, действующих на атомы, $< 10^{-5}$ эВ/Å) менее чем за 50 шагов, метод градиентного спуска не достигает минимума с такой же точностью и за 200 шагов, при этом максимальная сила в системе через 50–60 шагов составляет $\sim 10^{-3}$ эВ/Å.

Быстроту поиска минимума потенциальной энергии удалось получить не только за счёт выбора удачного метода спуска, но и за счёт комбинированного метода решения задачи линейного поиска из п. 2. Для поиска минимума α_n вдоль направления спуска g_n существует множество алгоритмов, из которых были выбраны два: 1) *метод аппроксимации параболой*; 2) *метод золотого сечения*.

В первом методе исследуемая функция потенциальной энергии как аргумента α приближается квадратичной, и в качестве минимума выбирается вершина параболы. Этот метод обладает хорошей сходимостью, однако является неустойчивым, поскольку очередное приближение точки минимума может выпасть из исследуемого отрезка. Во втором методе отрезок делится двумя точками в пропорциях золотого сечения и выбирается та точка, в которой энергия системы меньше. Этот метод сходится медленнее, но зато является более надёжным.

В нашем случае для поиска минимума функции вдоль направления использовался комбинированный метод: исследуемый отрезок $[\alpha_1; \alpha_4]$ разбивался на три части двумя точками:

$$\begin{aligned}\alpha_2 &= \alpha_4 - (\alpha_4 - \alpha_1)\Phi, \\ \alpha_3 &= \alpha_1 + (\alpha_4 - \alpha_1)\Phi,\end{aligned}$$

где $\Phi = (\sqrt{5} - 1) / 2$ – золотое сечение (рис. 1). Потенциальная энергия системы U вычислялась для значений шага α_2 , α_3 и α_4 , далее по этим трём опорным точкам (показаны белыми кружками на рис. 1) U как функция α приближалась квадратным трёхчленом $A\alpha^2 + B\alpha + C$. Если ветви параболы направлены вверх ($A > 0$) и точка минимума $\alpha_{\text{par}} = -B/(2A)$ лежит на отрезке $[\alpha_1; \alpha_4]$ (рис. 1а), то первым приближением искомого α берётся α_{par} , а отрезок сужается до отрезка $[\alpha_1; \alpha_2]$, $[\alpha_2; \alpha_3]$ или $[\alpha_3; \alpha_4]$ в зависимости от того, на какой из них попала точка α_{par} .

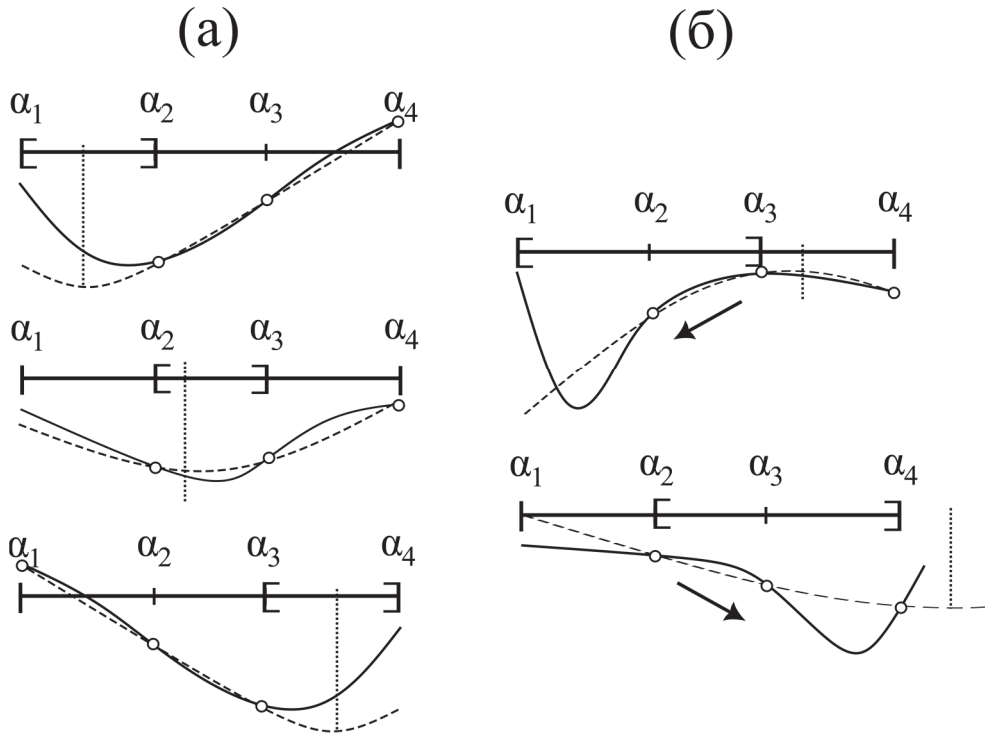


Рис. 1 / Fig. 1. Поиск минимума функции (сплошная линия) на отрезке $[\alpha_1; \alpha_4]$, поделённом точками α_2 и α_3 в золотом сечении, в случае, если аппроксимация параболой (пунктир) корректна (а) либо некорректна (б) / Minimum search for a function (solid line) on the segment $[\alpha_1; \alpha_4]$ divided by points α_2 and α_3 in the golden section, in the case when the approximation by a parabola (dotted line) is correct (a) or incorrect (б)

Источник: подготовлено автором.

В иных случаях, когда метод аппроксимации параболой даёт некорректный результат ($A \leq 0$ – максимум вместо минимума; $\alpha_{\text{par}} < \alpha_1$ или $\alpha_{\text{par}} > \alpha_4$ – выпадение точки минимума за пределы отрезка из-за неудачного расположения опорных точек), то сравниваются значения энергии U в точках α_2 и α_3 , из них выбирается наименьшее. Затем, в зависимости от выбора, исходный отрезок сужается до $[\alpha_1; \alpha_3]$ или $[\alpha_2; \alpha_4]$ (рис. 1б).

После сужения отрезка процедура повторяется до тех пор, пока длина отрезка не станет меньше заданной точности.

После нахождения минимума потенциальной энергии системы проводилась оптимизация постоянной решётки a . Для этого система в целом (все атомы, включая фиксированные) масштабировалась (растягивалась – сжималась) в соответствии с тем или иным коэффициентом a , фактически опять решается задача поиска минимума функции по конкретной переменной. Поэтому для поиска использовался тот же самый комбинированный метод (рис. 1), как и в задаче линейного поиска в методе сопряжённых градиентов (п. 2).

После подстройки постоянной решётки a алгоритм релаксации подвижных атомов по методу Флетчера-Ривса нужно запускать заново, поскольку энергетическое равновесие при изменении размеров блока как целого теряется. После релаксации – опять подстройка a и так далее, до момента, пока максимальная сила в системе не будет ниже установленного порога. Только в этом случае будет найдена конфигурация атомов, близкая к равновесному состоянию, тогда при записи конфигурации в файл и последующем чтении ошибки округления, которые для арифметики вещественных чисел с плавающей точкой двойной точности (8 бит) составляют ~ 16 знаков, не приведут к потере равновесия и необходимости повторной релаксации блока.

Для более эффективной работы алгоритма сначала мы ищем энергетический минимум грубо (силы равны нулю с точностью 10^{-3} эВ/Å), а после попадания в ближайшую окрестность минимума – точно (10^{-5} эВ/Å соответственно). При этом точность нахождения минимума в задаче линейного поиска при грубом и точном подходе также различались (табл. 1). После окончания процедуры точного поиска координаты атомов блока записывались в файл и вновь отдавались в программу релаксации, которая всё-таки запускалась снова, но уже достигала минимума за 1–5 шагов.

Таблица 1 / Table 1

Параметры грубой и точной релаксации атомного блока по методу сопряжённых градиентов / Parameters of coarse and fine relaxation of an atomic block using the conjugate gradient method

	Максимальная сила, эВ/Å	Максимальное число шагов	Точность поиска минимума (в ед. a)
Грубо	10^{-3}	100	10^{-6}
Точно	10^{-5}	50	10^{-10}

Параметры релаксированного блока. После завершения релаксации мы получаем значение постоянной решётки a как масштабного параметра, доставляющего минимум потенциальной энергии системы, условно назовём её *объёмной*. Однако для изучения эмиссии атомов с поверхности необходимо знать также постоянную решётки *на поверхности*, которая больше объёмной постоянной решётки. Отличие связано с тем, что у поверхностных атомов уменьшается координационное число, это приводит к перестройке верхних слоёв, которая компенсирует асимметрию межатомных взаимодействий на границе кристалл-вакуум.

Для верхнего слоя постоянной решётки вычислялась двумя способами: по первой координационной сфере (a_1) и по второй координационной сфере (a_2). Для этого вычислялись парные расстояния r_{ij} для каждой пары атомов i и j верхнего слоя, далее среди них выделялись значения, которые отличаются от радиуса координационной сферы в объёме $R_1 = a/\sqrt{2}$ или $R_2 = a$ менее, чем на 10%. Усреднение парных расстояний в каждой группе позволяет найти радиусы

координационных сфер на поверхности и постоянную решётки. Результаты вычислений для блоков разного размера представлены в табл. 2.

Таблица 2 / Table 2

Параметры, рассчитанные для атомных блоков различного размера / Parameters calculated for atomic blocks of different sizes

Размер блока $N_x \times N_y \times N_z$	Постоянная решётки, Å			Энергия связи, эВ		
	a	a_1	a_2	E_b	E_b^*	$ U_s $
7×7×7	3.5072	3.5231	3.5187	5.223	5.260	4.987
9×9×7						
11×11×7						
7×7×9	3.5094	3.5237	3.5192	5.225	5.261	4.987
9×9×9						
11×11×9						
7×7×11	3.5110	3.5241	3.5195	5.226	5.262	4.987
9×9×11						
11×11×11						

Как видно из табл. 2, значения постоянной решётки, рассчитанные по первой (a_1) и второй (a_2) координационным сферам, устойчиво превышают объёмное значение a для всех исследованных размеров блоков. Наблюдаемое небольшое различие между a_1 и a_2 указывает на анизотропный характер релаксации, при котором атомы испытывают не только вертикальные, но и латеральные смещения, по-разному влияющие на межатомные расстояния внутри поверхностного слоя и между слоями.

Кроме этого, для каждого блока вычислялась *поверхностная энергия связи* E_b , которая также очень важна для изучения финальной стадии распыления – эмиссии с поверхности. Для вычислений выбирался атом на поверхности блока, равноудалённый от боковых границ. Энергия связи, по определению, равна

$$E_b = U_{N-1} + U_1 - U_N,$$

где U_N – потенциальная энергия блока из N атомов, U_{N-1} – потенциальная энергия блока с одним удалённым атомом, U_1 – потенциальная энергия изолированного атома, которая равна нулю.

Энергию оставшегося блока можно вычислять с учётом или без учёта релаксации, будут получаться различные значения, которые мы обозначим U_{N-1} и U_{N-1}^* соответственно. Это приведёт к двум различным значениям энергии связи: E_b и E_b^* (табл. 2). Полученные значения согласуются со значением 5.55 эВ для грани (001) Ni в работе [19], где энергия связи вычислялась с использованием парного потенциала Морзе.

Ещё одну оценку энергии связи можно получить, если вычислить потенциальную энергию атома на поверхности U_s (табл. 2). Необходимо

отметить, что $|U_s|$ меньше E_b^* , это связано с тем, что при использовании ЕАМ потенциальная энергия системы не равна простой сумме энергий взаимодействия, и удаление атома с поверхности приводит к пересчёту электронных плотностей.

Для проверки корректности также вычислялась z -координата свободной поверхности блока как средняя координата \bar{z} атомов верхнего слоя и среднеквадратичное отклонение σ_z . За счёт различия постоянной решётки в объёме и на поверхности при релаксации верхний слой смещается так, что $\bar{z} \sim -0.1 \text{ \AA}$, $\sigma_z \approx 0$ с точностью более чем 10^{-6} \AA (то есть вздутие поверхности отсутствует).

Интегрирование уравнений движения. После релаксации системы запускается алгоритм интегрирования уравнений движения по методу молекулярной динамики. В предыдущих работах [10; 11] нами использовался метод средней силы [20], в котором по текущим значениям координат и скоростей сначала предсказываются координаты и скорости следующего положения:

$$\hat{x} = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{F(x(t), v(t), t)}{2m} \Delta t^2,$$

$$\hat{v} = v(t) + \frac{F(x(t), v(t), t)}{m} \Delta t,$$

а затем они пересчитываются заново:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{\langle F \rangle}{2m} \Delta t^2,$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{\langle F \rangle}{m} \Delta t,$$

с использованием значения силы, усреднённого по текущему и предсказанному положению:

$$\langle F \rangle = (F(x(t), v(t), t) + F(\hat{x}, \hat{v}, t + \Delta t))/2.$$

Порядок точности метода – второй.

При моделировании больших атомных систем важным вопросом является *симплектичность* численной схемы, то есть условие сохранения элемента объёма фазового пространства вдоль траектории. Неизбежная погрешность начальных условий приводит к тому, что точка фазового пространства превращается в малый фазовый объём. В симплектических методах этот объём сохраняется.

Анализ показал (см. Приложение 1), что в методе средней силы объём фазового пространства не сохраняется точно. В нашем случае, когда диссипация отсутствует и силы зависят явно только от координат, было получено, что фазовый объём сохраняется вплоть до порядка $O(\Delta t^3)$. Поэтому было решено использовать метод Верле для скоростей второго порядка, с одним шагом по координатам и двумя полушагами для скоростей:

$$v(t + \Delta t/2) = v(t) + \frac{F(x(t))}{m} \Delta t/2,$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t + \Delta t/2)\Delta t,$$

$$v(t + \Delta t) = v(t + \Delta t/2) + \frac{F(x(t + \Delta t))}{m} \Delta t/2.$$

В методе Верле фазовый объём сохраняется точно, поскольку якобиан преобразования тождественно равен 1.

В программе производилась проверка сохранения полной энергии системы и трёх проекций импульса системы. Расчёты показывают, что энергия сохраняется с точностью не хуже 10^{-7} эВ, проекции импульса – не хуже 10^{-8} эВ^{1/2} · а.е.м.^{1/2}.

При расчёте импульса системы необходимо было учесть, что на фиксированные атомы также действуют силы F_f , которые не приводят к изменению их скоростей, но осуществляют передачу импульса воображаемой подложке. Поэтому импульсы p_f фиксированных атомов будем интегрировать отдельно:

$$\begin{aligned} p_f(t + \Delta t/2) &= p_f(t) + F_f(x(t))\Delta t/2, \\ p_f(t + \Delta t) &= p_f(t + \Delta t/2) + F_f(x(t + \Delta t))\Delta t/2. \end{aligned}$$

Заключение

В настоящей работе описывалась молекулярно-динамическая модель атомного блока (001) Ni для задач ионного распыления. Была написана программа на языке Fortran, которая генерирует блок необходимых размеров, релаксирует его и просчитывает динамику по методу Верле для скоростей.

Расчёт сил в программе был реализован с помощью многочастичного ЕАМ-потенциала Чжоу-Джонсона-Уодли. На малых расстояниях парная часть потенциала сшивалась с потенциалом Зиглера-Бирсака-Литтмарка (ZBL) с помощью экспоненциально-кубического сплайна.

Для нескольких блоков различных размеров была проведена процедура релаксации. Минимум потенциальной энергии системы находился по методу сопряжённых градиентов Флетчера-Ривса (который показал свою высокую эффективность) в сочетании с оптимизацией по постоянной решётки a как масштабному параметру системы. Для задачи однопараметрической оптимизации был разработан метод, сочетающий в себе быстроту сходимости метода аппроксимации параболой и надёжность метода золотого сечения.

Для каждого релаксированного блока были рассчитаны параметры, которые необходимы для задачи эмиссии атомов при распылении поверхности – постоянная решётки для верхнего слоя и поверхностная энергия связи. Постоянная решётки ~ 3.52 Å очень близка к табличному значению, использовавшемуся нами ранее [10; 11]. Значение энергии связи ~ 5.2 эВ получилось выше табличного значения 4.435 эВ, которое мы использовали в [10; 11], однако близко к значению энергии связи в классической работе [19], полученному с помощью парного потенциала Морзе.

Полученные параметры (постоянная решётки, энергия связи) стабильны для разных размеров блока и соответствуют данным литературы, что подтверждает адекватность выбранного потенциала и процедуры релаксации.

Было показано, что использовавшийся ранее [10; 11] метод средней силы не является строго симплектическим, сохраняя фазовый объём с точностью до третьего порядка по временному шагу $O(\Delta t^3)$. Поэтому для интегрирования уравнений динамики был выбран метод Верле для скоростей, который сохраняет фазовый объём точно. После отладки алгоритма численного интегрирования энергия и импульс системы сохраняются.

Сказанное выше подтверждает корректность созданной модели и позволяет использовать её для дальнейших исследований эмиссии атомов с поверхности (001) Ni.

Приложение 1. Элемент объёма в фазовом пространстве и метод средней силы

Рассмотрим систему одинаковых частиц (атомов) с s степенями свободы, для которой фазовое пространство Ω задаётся каноническими координатами $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_s)$ и импульсами $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_s)$, и гамильтониан

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{q}).$$

В таком случае силы $\mathbf{F} = -\nabla U$ зависят прямо только от координат \mathbf{q} . Без ограничения общности можно считать, что масса частиц $m = 1$.

В численном методе интегрирования уравнений движения по методу средней силы [20] мы вначале предсказываем координаты (предиктор):

$$\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}(t) + \mathbf{p}(t)\Delta t + \mathbf{F}(\mathbf{q}(t)) \Delta t^2/2,$$

а затем, используя значения сил, усреднённых по текущим и предсказанным координатам, находим координаты и импульсы в следующий момент времени (корректор):

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(t + \Delta t) &= \mathbf{q}(t) + \mathbf{p}(t)\Delta t + \left(\mathbf{F}(\mathbf{q}(t)) + \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) \right) \Delta t^2/4, \\ \mathbf{p}(t + \Delta t) &= \mathbf{p}(t) + \left(\mathbf{F}(\mathbf{q}(t)) + \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) \right) \Delta t/2. \end{aligned}$$

В дальнейшем, для краткости, будем обозначать координаты и импульсы в текущий момент времени просто \mathbf{p} и \mathbf{q} , а в следующий – \mathbf{p}' и \mathbf{q}' . Тогда

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{q}} &= \mathbf{q} + \mathbf{p}\Delta t + \mathbf{F}(\mathbf{q}) \Delta t^2/2, \\ \mathbf{q}' &= \mathbf{q} + \mathbf{p}\Delta t + \left(\mathbf{F}(\mathbf{q}) + \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) \right) \Delta t^2/4, \\ \mathbf{p}' &= \mathbf{p} + \left(\mathbf{F}(\mathbf{q}) + \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) \right) \Delta t/2. \end{aligned}$$

Бесконечно малый элемент объёма фазового пространства преобразуется через якобиан J :

$$d\Omega' = d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' = J d\mathbf{q} d\mathbf{p} = J d\Omega,$$

который можно записать в блочном виде

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{q}} & \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{p}} & \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{p}} \end{vmatrix}.$$

При вычислении производных необходимо учесть зависимость предсказанной координаты от текущих координат и импульсов:

$$\frac{\partial \hat{q}_k}{\partial q_j} = \delta_{kj} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial F_k}{\partial q_j},$$

$$\frac{\partial \hat{q}_k}{\partial p_j} = \delta_{kj} \Delta t,$$

поэтому

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i(\hat{\mathbf{q}})}{\partial q_j} &= \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \cdot \frac{\partial \hat{q}_k}{\partial q_j} = \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \left(\delta_{kj} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial F_k}{\partial q_j} \right) = \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j} + \frac{\Delta t^2}{2} \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \frac{\partial F_k}{\partial q_j}, \\ \frac{\partial F_i(\hat{\mathbf{q}})}{\partial p_j} &= \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \cdot \frac{\partial \hat{q}_k}{\partial p_j} = \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \delta_{kj} \Delta t = \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j} \Delta t. \end{aligned}$$

Используя эти результаты, для блоков якобиана получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial q'_i}{\partial q_j} &= \delta_{ij} + \frac{\Delta t^2}{4} \left(\frac{\partial F_i}{\partial q_j} + \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j} \right) + \frac{\Delta t^4}{8} \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \frac{\partial F_k}{\partial q_j}, \\ \frac{\partial q'_i}{\partial p_j} &= \delta_{ij} \Delta t + \frac{\Delta t^3}{4} \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j}, \\ \frac{\partial p'_i}{\partial q_j} &= \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial F_i}{\partial q_j} + \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j} \right) + \frac{\Delta t^3}{4} \sum_k \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_k} \frac{\partial F_k}{\partial q_j}, \\ \frac{\partial p'_i}{\partial p_j} &= \delta_{ij} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j}. \end{aligned}$$

Запишем блоки, пренебрегая слагаемыми с произведениями частных производных сил:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{q}} &= \mathbf{I} + \frac{\Delta t^2}{4} (\nabla \mathbf{F}(\mathbf{q}) + \nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}})) + O(\Delta t^4), \\ \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{p}} &= \mathbf{I} \Delta t + \frac{\Delta t^3}{4} \nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}), \\ \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{q}} &= \frac{\Delta t}{2} (\nabla \mathbf{F}(\mathbf{q}) + \nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}})) + O(\Delta t^3), \\ \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{p}} &= \mathbf{I} + \frac{\Delta t^2}{2} \nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}), \end{aligned}$$

здесь \mathbf{I} – единичная матрица размера $s \times s$, $\nabla \mathbf{F}$ – матрица частных производных сил по координатам.

Воспользуемся формулой Шура для определителя блочной матрицы:

$$J = \det \left(\frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{q}} \right) \det S,$$

где S – дополнение Шура:

$$S = \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{q}} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{p}'}{\partial \mathbf{q}}.$$

Также используем формулы разложения обратной матрицы и определителя по малому параметру ϵ :

$$\begin{aligned} (I + \epsilon A)^{-1} &= I - \epsilon A + O(\epsilon^2), \\ \det(I + \epsilon A) &= 1 + \epsilon \operatorname{tr} A + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

(A – произвольная матрица, $\text{tr } A$ – её след). Получим

$$\det \left(\frac{\partial \mathbf{q}'}{\partial \mathbf{q}} \right) = 1 + \frac{\Delta t^2}{4} \text{tr}(\nabla \mathbf{F}(\mathbf{q}) + \nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}})) + O(\Delta t^4),$$

$$\det S = \det \left(\mathbf{I} - \frac{\Delta t^2}{2} \nabla \mathbf{F}(\mathbf{q}) + O(\Delta t^4) \right) = 1 - \frac{\Delta t^2}{2} \text{tr} \nabla \mathbf{F}(\mathbf{q}) + O(\Delta t^4),$$

$$J = 1 + \frac{\Delta t^2}{4} \text{tr}(\nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) - \nabla \mathbf{F}(\mathbf{q})) + O(\Delta t^4).$$

Выполним разложение в ряд Тейлора:

$$\frac{\partial F_i}{\partial \hat{q}_j} - \frac{\partial F_i}{\partial q_j} = \sum_k \frac{\partial^2 F_i}{\partial q_k \partial q_j} (\hat{q}_k - q_k) + O(\|\hat{\mathbf{q}} - \mathbf{q}\|^2),$$

$$\hat{q}_k - q_k = p_k \Delta t + O(\Delta t^2),$$

$$\text{tr}(\nabla \mathbf{F}(\hat{\mathbf{q}}) - \nabla \mathbf{F}(\mathbf{q})) = \Delta t \sum_{i,k} \frac{\partial^2 F_i}{\partial q_k \partial q_i} p_k + O(\Delta t^2).$$

Окончательный ответ:

$$J = 1 + \frac{\Delta t^3}{4} \sum_{i,k} \frac{\partial^2 F_i}{\partial q_k \partial q_i} p_k + O(\Delta t^4).$$

Если силы гармонические, то коэффициенты при Δt^3 обнуляются, в этом случае фазовый объём сохраняется с точностью $O(\Delta t^4)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Secondary ion mass spectrometry / N. P. Lockyer, S. Aoyagi, J. S. Fletcher, I. S. Gilmore, P. A. W. van der Heide, K. L. Moore, B. J. Tyler, L. -T. Weng // Nature Reviews Methods Primers. 2024. Vol. 4. No. 1. Article no. 32. DOI: 10.1038/s43586-024-00311-9.
2. Модификация рельефа поверхности аддитивных материалов при облучении ионами Ar^+ / Д. С. Киреев, К. Ф. Миннебаев, В. А. Киселевский, А. Е. Иешкин // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2024. Т. 79. № 4. С. 2440501. DOI: 10.55959/MSU0579-9392.79.2440501.
3. Исследование влияния травления ионными пучками на шероховатость поверхности монокристаллического сапфира / М. С. Михайленко, А. Е. Пестов, М. В. Зорина, А. К. Чернышев, Н. И. Чхало, И. Э. Шевчук // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2023. № 12. С. 25–30. DOI: 10.31857/S1028096023120154.
4. Структурные особенности текстурированных пленок оксида цинка, полученных методом ионного распыления / В. Г. Костишин, А. Ю. Миронович, А. В. Тимофеев, И. М. Исаев, Р. И. Шакирзянов, А. И. Риль, А. А. Сергиенко // Физика и техника полупроводников. 2021. Т. 55. № 3. С. 230–236. DOI: 10.21883/FTP.2021.03.50600.9542.

5. The cosmic-ray induced sputtering process on icy grains / Ö. Arslan, S. Hocuk, P. Caselli, I. Küçük // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2023. Vol. 518. Iss. 2. P. 2050–2067. DOI: 10.1093/mnras/stac3196.
6. Шпиньков В. И., Самойлов В. Н. О фокусировке атомов, распыленных с грани (001) Ni, в случае гауссовых пучков эмитируемых атомов // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2009. № 3. С. 73–79.
7. Самойлов В. Н., Носов Н. В. Эффекты фокусировки по азимутальному углу атомов, эмитированных с граней (001) Ni и (001) Au // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2014. № 3. С. 81–92. DOI: 10.7868/S0207352814030202.
8. Sigmund P. Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets // *Physical Review*. 1969. Vol. 184. Iss. 2. P. 383–416. DOI: 10.1103/PhysRev.184.383.
9. Sigmund P. Errata. Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets // *Physical Review*. 1969. Vol. 187. Iss. 2. P. 768. DOI: 10.1103/PhysRev.187.768.
10. Мусин А. И., Самойлов В. Н. О сдвиге максимума полярного углового распределения распыленных атомов в МД-модели распыления грани (001) Ni // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2024. № 6. С. 31–37. DOI: 10.31857/S1028096024060048.
11. Мусин А. И., Самойлов В. Н. Об особенностях формирования полярного распределения распыленных атомов в МД-модели распыления грани (001) Ni // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2025. № 3. С. 17–22. DOI: 10.31857/S1028096025030039.
12. Kornich G. V., Betz G. MD simulation of atomic displacements in pure metals and metallic bilayers during low energy ion bombardment at 0 K // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 1998. Vol. 143. Iss. 4. P. 455–472. DOI: 10.1016/S0168-583X(98)00410-8.
13. Simple N-body potentials for the noble metals and nickel / G. J. Ackland, G. Tichy, V. Vitek, M. W. Finnis // *Philosophical Magazine A*. 1987. Vol. 56. Iss. 6. P. 735–756. DOI: 01418618708204485.
14. Supercomputer Lomonosov-2: Large Scale, Deep Monitoring and Fine Analytics for the User Community / Vl. V. Voevodin, A. S. Antonov, D. A. Nikitenko, P. A. Shvets, S. I. Sobolev, I. Yu. Sidorov, K. S. Stefanov, V. V. Voevodin, S. A. Zhumatiy // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2019. Vol. 6. No. 2. P. 4–11. DOI: 10.14529/jsfi190201.
15. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. VMD: Visual molecular dynamics // *Journal of Molecular Graphics*. 1996. Vol. 14. Iss. 1. P. 33–38. DOI: 10.1016/0263-7855(96)00018-5.
16. Zhou X. W., Johnson R. A., Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B*. 2004. Vol. 69. Iss. 14. Article no. 144113. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.

17. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. Empirical stopping powers for ions in solids // Charge states and dynamic screening of swift ions in solids: Proceedings of the U. S. – Japan Seminar on Charged-Particle Penetration Phenomena (January, 25–29, East-West Center, Honolulu, Hawaii). Oak Ridge, TN (USA): Oak Ridge National Lab., 1983. P. 88–100.
18. Fletcher R., Reeves C. M. Function minimization by conjugate gradients // The Computer Journal. 1964. Vol. 7. Iss. 2. P. 149–154. DOI: 10.1093/comjnl/7.2.149.
19. Jackson D. P. Binding energies in cubic metal surfaces // Radiation Effects. 1973. Vol. 18. Iss. 3-4. P. 185–189. DOI: 10.1080/00337577308232120.
20. Harrison D. E., Gay W. L., Efron H. M. Algorithm for the calculation of the classical equations of motion of an N-body system // Journal of Mathematical Physics. 1969. Vol. 10. Iss. 7. P. 1179–1184. DOI: 10.1063/1.1664955.

REFERENCES

1. Lockyer, N. P., Aoyagi, S., Fletcher, J. S., Gilmore, I. S., van der Heide, P. A. W., Moore, K. L., Tyler, B. J. & Weng, L.-T. (2024). Secondary ion mass spectrometry. In: *Nature Reviews Methods Primers*, 4 (1), article no. 32. DOI: 10.1038/s43586-024-00311-9.
2. Kireev, D. S., Minnebaev, K. F., Kiselevskiy, V. A. & Ieshkin, A. E. (2024). Modification of the Surface Topography of Additive Materials under Ar+ Ion Irradiation. In: *Moscow University Physics Bulletin*, 79 (4), p. 2440501. DOI: 10.55959/MSU0579-9392.79.2440501 (in Russ.).
3. Mikhailenko, M. S., Pestov, A. E., Zorina, M. V., Chernyshev, A. K., Chkhalo, N. I. & Shevchuk, I. E. (2023). Study of the influence of ion-beam etching on the surface roughness of single-crystal sapphire. In: *Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 12, 25–30. DOI: 10.31857/S1028096023120154 (in Russ.).
4. Kostishin, V. G., Mironovich, A. Y., Timofeev, A. V., Isaev, I. M., Shakirzyanov, R. I., Ril, A. I. & Sergienko, A. A. (2021). Structural features of textured zinc-oxide films obtained by the ion-beam sputtering method. In: *Semiconductors*, 55 (3), 230–236. DOI: 10.21883/FTP.2021.03.50600.9542 (in Russ.).
5. Arslan, Ö., Hocuk, S., Caselli, P. & Küçük, I. (2023). The cosmic-ray induced sputtering process on icy grains. In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 518 (2), 2050–2067. DOI: 10.1093/mnras/stac3196.
6. Shpinkov, V. I. & Samoilo, V. N. (2009). Focusing of Atoms Sputtered from (001)Ni Surface for Gaussian Distribution of Ejected Atoms. In: *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 3, 73–79 (in Russ.).
7. Samoilo, V. N. & Nosov, N. V. (2014). Effects of the Azimuthal Angle Focusing of Atoms Ejected from (001) Ni and (001) Au. In: *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 3, 81–92. DOI: 10.7868/S0207352814030202 (in Russ.).

8. Sigmund, P. (1969). Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets. In: *Physical Review*, 184 (2), 383–416. DOI: 10.1103/PhysRev.184.383.
9. Sigmund, P. (1969). Errata. Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets. In: *Physical Review*, 187 (2), 768. DOI: 10.1103/PhysRev.187.768.
10. Musin, A. I. & Samoilo, V. N. (2024). On the shift of the maximum of the polar angular distribution of sputtered atoms in the md model of the (001) Ni face sputtering. In: *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 6, 31–37. DOI: 10.31857/S1028096024060048 (in Russ.).
11. Musin, A. I. & Samoilo, V. N. (2025). On the features of the formation of polar distribution of sputtered atoms in the md model of the (001) Ni face sputtering. In: *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 3, 17–22. DOI: 10.31857/S1028096025030039 (in Russ.).
12. Kornich, G. V. & Betz, G. (1998). MD simulation of atomic displacements in pure metals and metallic bilayers during low energy ion bombardment at 0 K. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 143 (4), 455–472. DOI: 10.1016/S0168-583X(98)00410-8.
13. Ackland, G. J., Tichy, G., Vitek, V. & Finnis, M. W. (1987). Simple N-body potentials for the noble metals and nickel. In: *Philosophical Magazine A*, 56 (6), 735–756. DOI: 01418618708204485.
14. Voevodin, V. V., Antonov, A. S., Nikitenko, D. A., Shvets, P. A., Sobolev, S. I., Sidorov, I. Yu., Stefanov, K. S., Voevodin, V. V. & Zhumatiy, S. A. (2019). Supercomputer Lomonosov-2: Large Scale, Deep Monitoring and Fine Analytics for the User Community. In: *Supercomputing Frontiers and Innovations*, 6 (2), 4–11. DOI: 10.14529/jsfi190201.
15. Humphrey, W., Dalke, A. & Schulten, K. (1996). VMD: Visual molecular dynamics. In: *Journal of Molecular Graphics*, 14 (1), 33–38. DOI: 10.1016/0263-7855(96)00018-5.
16. Zhou, X. W., Johnson, R. A. & Wadley, H. N. G. (2004). Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. In: *Physical Review B*, 69 (14), article no. 144113. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
17. Ziegler, J. F., Biersack, J. P. & Littmark, U. (1983). Empirical stopping powers for ions in solids. In: *Charge states and dynamic screening of swift ions in solids: Proceedings of the U. S. – Japan Seminar on Charged-Particle Penetration Phenomena (January, 25–29, East-West Center, Honolulu, Hawaii)*. Oak Ridge, TN (USA): Oak Ridge National Lab., pp. 88–100.
18. Fletcher, R. & Reeves, C. M. (1964). Function minimization by conjugate gradients. In: *The Computer Journal*, 7 (2), 149–154. DOI: 10.1093/comjnl/7.2.149.
19. Jackson, D. P. (1973). Binding energies in cubic metal surfaces. In: *Radiation Effects*, 18 (3-4), 185–189. DOI: 10.1080/00337577308232120.
20. Harrison, D. E., Gay, W. L. & Effron H. M. (1969). Algorithm for the calculation of the classical equations of motion of an N-body system. In: *Journal of Mathematical Physics*, 10 (7), 1179–1184. DOI: 10.1063/1.1664955.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Мусин Артем Игоревич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Московского государственного технологического университета «СТАНКИН»; доцент кафедры физики и методики обучения физике Вятского государственного университета;

<https://orcid.org/0000-0002-3167-9023>; e-mail: ai.musin@physics.msu.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Artem I. Musin – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Physics, Moscow State University of Technology “STANKIN”; Assoc. Prof., Department of Physics and Teaching Physics, Vyatka State University;

<https://orcid.org/0000-0002-3167-9023>; e-mail: ai.musin@physics.msu.ru

Научная статья

УДК 533.15

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-2-47-54

КИНЕТИЧЕСКИЙ МОМЕНТ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ И РАЗМЕР АТОМА ГЕЛИЯ

Павлов В. Д.

*Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых, г. Владимир, Российская Федерация
e-mail: pavlov.val.75@mail.ru*

Поступила в редакцию 02.06.2025

Принята к публикации 06.06.2025

Аннотация

Цель – корректировка значения радиуса атома гелия.

Процедура и методы. Используется полуклассическое рассмотрение, которое для цели работы является вполне достаточным.

Результаты. Необходимость исключения двойных стандартов при определении момента импульса квантовых систем приводит к тому, что квантом момента импульса \hbar наделяется не каждый электрон атома гелия, а их квантовая совокупность. Следствием этого является корректировка значения радиуса атома гелия, который оказался практически в четыре раза меньше табличного значения. Найдена скорректированная формула для радиуса атома гелия: $r_{1,2} = [1 + (1 + 7\alpha^2)]a_0/14 = 7,56 \cdot 10^{-12}$ (м).

Теоретическая и/или практическая значимость заключается в том, что размер атома гелия имеет существенное значение, в частности для мембранных технологий.

Ключевые слова: гелий, квантовая система, квант момента импульса, радиус атома, диффузия

Для цитирования.

Павлов В. Д. Кинетический момент квантовых систем и размер атома гелия // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 2. С.47–54. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-47-54>

Original research article

KINETIC MOMENTUM OF QUANTUM SYSTEMS AND THE SIZE OF THE HELIUM ATOM

V. Pavlov

Vladimir State University, Vladimir, Russian Federation

e-mail: pavlov.val.75@mail.ru

Received by the editorial office 23.06.2025

Accepted for publication 07.07.2025

Abstract

Aim is to correct the value of the radius of the helium atom.

Methodology. A semi-classical approach is used, which is quite sufficient for the purpose of the work.

Results. The need to eliminate double standards when determining the angular momentum of quantum systems leads to the fact that the quantum of angular momentum \hbar is assigned not to each electron of the helium atom, but to their quantum set. The consequence of this is the correction of the value of the radius of the helium atom, which turned out to be almost four times smaller than the tabulated value. A corrected formula for the radius of the helium atom has been found: $r_{1,2} = [1 + (1 + 7\alpha^2)]a_0/14 = 7,56 \cdot 10^{-12}$ (м).

Research implications lie in the fact that the size of the helium atom is of significant importance, in particular for membrane technologies

Keywords: helium, quantum system, quantum of angular momentum, atomic radius, diffusion

For citation:

Pavlov, V. D. (2025). Kinetic momentum of quantum systems and the size of the helium atom. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2, pp. 47–54. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-47-54>

Введение

Размер атома гелия имеет существенное значение, в частности, для мембранных технологий.

Электроны атома гелия образуют квантовую систему [1–3] подобно куперовской паре электронов в сверхпроводниках [4] или паре электрон-позитрон в атоме позитрония [5; 6]. Вместо фононов, связывающих электроны куперовской пары, «посредником» у электронов атома гелия является кулоновское притяжение ядра. Другими словами, квантовая система электронов атома гелия ничем не «хуже» куперовской пары.

Квантовые системы [7; 8] и в частности куперовская пара электронов и пара электрон-позитрон характеризуются тем, что квантом момента импульса \hbar (без учёта спина) наделялась не каждая её частица, а вся квантовая система целиком (строго говоря, \hbar – не сам момент импульса, а его проекция на направление магнитного поля; далее имеется в виду именно это), т. е.:

$$2m_e v r = \hbar. \quad (1)$$

Здесь m_e – масса электрона (и позитрона), v – его скорость, r – радиус движения.

Далее будет показано, что существующее расчётное значение радиуса атома гелия связано с тем, что *каждый* из его двух электронов наделялся квантом момента импульса \hbar (без учёта спина). Соответственно, момент импульса пары электронов гелия равен

$$2m_e v r = 2\hbar. \quad (2)$$

Налицо двойные стандарты при наделинии квантовых систем моментом импульса [9].

А поскольку двойные стандарты неприемлемы, на электроны атома гелия следует обобщить условие (1).

Это, конечно, приведёт к корректировке значения радиуса атома, что и является целью настоящей работы.

Далее используется полуклассическое рассмотрение, которое для цели работы является вполне достаточным.

Вычисление радиуса атома гелия с учётом двух квантов момента импульса

Кулоновская сила притяжения любого электрона к ядру равна

$$F_{+-} = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\text{He}}^2}.$$

Здесь e – заряд электрона, ϵ_0 – постоянная электрическая, r_{He} – радиус атома гелия.

За счёт кулоновского отталкивания электронов наиболее *вероятно* (с оглядкой на квантовую механику), что они диаметрально противоположны друг другу относительно ядра. При этом сила отталкивания электронов друг от друга равна

$$F_{--} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r_{\text{He}})^2}.$$

Коэффициент «2» в знаменателе обусловлен тем, что расстояние между электронами вдвое больше радиуса атома.

Центробежная сила равна

$$F_v = \frac{m_e v^2}{r_{\text{He}}}.$$

Баланс сил, действующих на любой электрон,

$$F_{+-} - F_{--} = F_v,$$

$$\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\text{He}}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r_{\text{He}})^2} = \frac{m_e v^2}{r_{\text{He}}},$$

$$1,75 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\text{He}}^2} = \frac{m_e v^2}{r_{\text{He}}}. \quad (3)$$

Из (2) следует

$$r_{\text{He}}^2 = \frac{\hbar^2}{m_e^2 v^2}.$$

Подстановка в (3)

$$1,75 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{m_e^2 v^2}{\hbar^2} = \frac{m_e v^2}{r_{\text{He}}},$$

$$r_{\text{He}} = \frac{4}{7} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} = \frac{4}{7} a_0.$$

Здесь

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} - \text{боровский радиус атома водорода} \quad (4)$$

В численном значении

$$r_{\text{He}} = \frac{4}{7} a_0 = \frac{4}{7} 5,2917721092 \cdot 10^{-11} \approx 30,24 \cdot 10^{-12} (\text{м}).$$

Почти совпадает с табличным значением $31 \cdot 10^{-12} (\text{м})$.

Таким образом, как и было анонсировано выше, радиус атома гелия рассчитывается с учётом того, что *каждый* из его двух электронов наделяется квантом момента импульса \hbar . Другими словами, игнорируется то обстоятельство, что электроны атома гелия образуют квантовую систему.

Вычисление радиуса атома гелия с учётом образования его электронами двухчастичной квантовой системы

Помимо сил кулоновского взаимодействия между электронами действует сила магнитного отталкивания [10]

$$F_{\mu} = \frac{\mu_0 e^2 v^2}{4\pi(2r_{\text{He}})^2}.$$

Здесь μ_0 – постоянная магнитная.

Баланс сил, действующих на любой электрон:

$$F_{+-} - F_{--} - F_{\mu} = F_v,$$

$$\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\text{He}}^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r_{\text{He}})^2} - \frac{\mu_0 e^2 v^2}{4\pi(2r_{\text{He}})^2} = \frac{m_e v^2}{r_{\text{He}}},$$

$$1,75 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\text{He}}^2} - \frac{\mu_0 e^2 v^2}{4\pi(2r_{\text{He}})^2} = \frac{m_e v^2}{r_{\text{He}}},$$

$$\begin{aligned} \frac{7e^2}{16\pi\epsilon_0 r_{\text{He}}^2} - \frac{\mu_0 e^2 v^2}{16\pi r_{\text{He}}^2} &= \frac{m_e v^2}{r_{\text{He}}}, \\ \frac{7e^2/\epsilon_0 - \mu_0 e^2 v^2}{16\pi r_{\text{He}}^2} &= \frac{m_e v^2}{r_{\text{He}}}, \\ r_{\text{He}} &= \frac{7e^2/\epsilon_0 - \mu_0 e^2 v^2}{16\pi m_e v^2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Из (1) следует

$$v^2 = \frac{\hbar^2}{4m_e^2 r_{\text{He}}^2}.$$

Подстановка в (5):

$$\begin{aligned} r_{\text{He}} &= \frac{7e^2/\epsilon_0 - \mu_0 e^2 \hbar^2 / (4m_e^2 r_{\text{He}}^2)}{16\pi m_e \hbar^2 / (4m_e^2 r_{\text{He}}^2)}, \\ 16\pi m_e \hbar^2 r_{\text{He}} &= \frac{7e^2}{\epsilon_0} 4m_e^2 r_{\text{He}}^2 - \mu_0 e^2 \hbar^2, \\ r_{\text{He}}^2 - 16\pi m_e \hbar^2 \frac{\epsilon_0}{28e^2 m_e^2} r_{\text{He}} - \mu_0 e^2 \hbar^2 \frac{\epsilon_0}{28e^2 m_e^2} &= 0, \\ r_{\text{He}}^2 - \frac{16\pi \hbar^2 \epsilon_0}{28e^2 m_e} r_{\text{He}} - \frac{\epsilon_0 \mu_0 \hbar^2}{28m_e^2} &= 0. \end{aligned}$$

С учётом (4):

$$\begin{aligned} r_{\text{He}}^2 - \frac{1}{7} a_0 r_{\text{He}} - \frac{\hbar^2}{28m_e^2 c^2} &= 0, \\ r_{1,2} &= \frac{1}{14} a_0 \pm \sqrt{\frac{1}{196} a_0^2 + \frac{\hbar^2}{28m_e^2 c^2}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Постоянная тонкой структуры равна

$$\alpha = \frac{\mu_0 c e^2}{2h}.$$

Масса электрона равна

$$m_e = \frac{e^2 \mu_0}{4\pi a_0 \alpha^2} = \frac{e^2 \mu_0}{4\pi a_0 \alpha} \frac{2h}{\mu_0 c e^2} = \frac{\hbar}{c a_0 \alpha}.$$

Возвращаясь к (6),

$$r_{1,2} = \frac{1}{14}a_0 \pm \sqrt{\frac{1}{196}a_0^2 + \frac{\hbar^2}{28c^2} \frac{c^2 a_0^2 \alpha^2}{\hbar^2}} =$$

$$= \frac{1}{14}a_0 \pm a_0 \sqrt{\frac{1}{196} + \frac{\alpha^2}{28}}.$$

Минимальное значение очевидным образом не подходит. Поэтому

$$r_{1,2} = \frac{1 + \sqrt{1 + 7\alpha^2}}{14} a_0.$$

В численном значении

$$r_{1,2} = \frac{1 + \sqrt{1 + 7 \cdot 7,297\,352\,5643^2 \cdot 10^{-6}}}{14} 5,2917721092 \cdot 10^{-11} =$$

$$= 7,5603788612 \cdot 10^{-12} (\text{м}).$$

Это практически в четыре раза меньше табличного значения.

Заключение

Необходимость исключения двойных стандартов при определении момента импульса квантовых систем приводит к тому, что квантом момента импульса \hbar наделяется не каждый электрон атома гелия, а их квантовая совокупность. Следствием этого является корректировка значения радиуса атома гелия, который оказался практически в четыре раза меньше табличного значения.

Это обстоятельство имеет существенное значение для мембранных технологий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Васильева О. Ф., Зинган А. П. Временная эволюция бозе-конденсированных атомов в трёхъямной ловушке, при условии отличной от нуля начальной заселённости первой ямы // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2022. № 2. С. 28–41. DOI: 10.18384/2310-7251-2022-2-28-41.
2. Васильева О. Ф., Зинган А. П. Временная эволюция бозе-конденсированных атомов в трёхъямной симметричной цепочной ловушке // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2021. № 1. С. 27–38. DOI: 10.18384/2310-7251-2021-1-27-38.
3. Доловова О. А., Горбунов М. Е. Системы двухатомных полярных молекул в одномерной геометрии оптических и магнито-оптических ловушек // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2021. № 4. С. 86–95. DOI: 10.18384/2310-7251-2021-4-86-95.

4. Павлов В. Д. О моменте импульса куперовской пары электронов и кванте магнитного потока // Прикладная физика и математика. 2024. № 4. С. 12–16. DOI: 10.25791/pfi.m.04.2024.1301.
5. Попов И. П. О размере атома позитрония в контексте задачи двух тел // Прикладная физика и математика. 2024. № 2-2. С. 14–16. DOI: 10.25791/pfim.02.2024.1291.
6. Попов И. П. Вычисление размера позитрония // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2024. № 3. С. 75–85. DOI: 10.21685/2072-3040-2024-3-7.
7. Асимптотическое приближение для функции распределения пар молекул в ударной волне / И. В. Демидов, М. М. Кузнецов, М. К. Кузьмин, Ю. Д. Кулешова // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2020. № 4. С. 86–94. DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-86-94.
8. Самсоненко Н. В., Сёмин М. В. Релятивистская кинематика двухчастичных реакций рассеяния с участием тахионов // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2020. № 2. С. 102–117. DOI: 10.18384/2310-7251-2020-2-102-117.
9. Попов И. П. Двойные стандарты при описании атомов гелия и позитрония // Вестник Томского государственного университета. Химия. 2024. № 35. С. 143–151. DOI: 10.17223/24135542/35/11.
10. Самсоненко Н. В., Ндахайо Ф., Алибин М. А. Влияние магнитного взаимодействия на спектр масс элементарных частиц // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2020. № 2. С. 118–127. DOI: 10.18384/2310-7251-2020-2-118-127.

REFERENCES

1. Vasilieva, O. F. & Zingan, A. P. (2022). Time evolution of Bose-condensed atoms in a three-well trap under the condition of a non-zero initial population of the first well. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2, 28–41. DOI: 10.18384/2310-7251-2022-2-28-41 (in Russ.).
2. Vasilieva, O. F. & Zingan, A. P. (2021). Temporary evolution of Bose-condensed atoms in a three-well symmetric chain trap. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 1, 27–38. DOI: 10.18384/2310-7251-2021-1-27-38 (in Russ.).
3. Dolovova, O. A. & Gorbunov, M. E. (2021). Systems of diatomic polar molecules in one-dimensional geometry of optical and magneto-optical traps. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 4, 86–95. DOI: 10.18384/2310-7251-2021-4-86-95 (in Russ.).
4. Pavlov, V. D. (2024). On the momentum of a cooper pair of electrons and the magnetic flux quantum. In: *Applied Physics and Mathematics*, 4, 12–16. DOI: 10.25791/pfi.m.04.2024.1301 (in Russ.).

5. Popov, I. P. (2024). On the size of the positronium atom in the context of the two-body problem. In: *Applied Physics and Mathematics*, 2-2, 14–16. DOI: 10.25791/pfim.02.2024.1291 (in Russ.).
6. Popov, I. P. (2024). Calculating the size of positronium. In: *University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*, 3, 75–85. DOI: 10.21685/2072-3040-2024-3-7 (in Russ.).
7. Demidov, I. V., Kuznetsov, M. M., Kuzmin, M. K. & Kuleshova, Ju. D. (2020). Asymptotic approximation for the distribution of pairs of molecules in the shock wave. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics*, 4, 86–94. DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-86-94 (in Russ.).
8. Samsonenko, N. V. & Semin, M. V. (2020). Relativistic kinematics of two-particle scattering reactions with participation of tachions. In: *Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2, 102–117. DOI: 10.18384/2310-7251-2020-2-102-117 (in Russ.).
9. Popov, I. P. (2024). Double standards when describing helium and positronium atoms. In: *Tomsk State University Journal of Chemistry*, 35, 143–151. DOI: 10.17223/24135542/35/11 (in Russ.).
10. Samsonenko, N. V., Ndahayo, F. & Alibin, M. A. (2020). Influence of the magnetic interactions on the mass spectrum of elementary particles. In: *Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2, 118–127. DOI: 10.18384/2310-7251-2020-2-118-127 (in Russ.).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Павлов Валентин Дмитриевич (г. Владимир) – кандидат технических наук, доцент кафедры общей и прикладной физики Владимирского государственного университета имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых; <https://orcid.org/0000-0003-2125-4897>; e-mail: pavlov.val.75@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Valentin D. Pavlov (Vladimir) – Cand. Sci. (Engineering), Assoc. Prof., Department of General and Applied Physics, Vladimir State University; <https://orcid.org/0000-0003-2125-4897>; e-mail: pavlov.val.75@mail.ru

Научная статья

УДК 53.092

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-2-55-65

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ УДАРНЫХ ВОЛН В СЫПУЧЕМ И МОНОЛИТНОМ АНДЕЗИТЕ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ ИНТЕРФЕРОМЕТРИИ

Зиборов В. С.^{1}, Ростиллов Т. А.¹, Дольников Г. Г.²*

¹ Объединённый институт высоких температур Российской академии наук, г. Москва, Российская Федерация

² Институт космических исследований Российской академии наук, г. Москва, Российская Федерация

*Корреспондирующий автор, e-mail: ziborov.vs@yandex.ru

Поступила в редакцию 05.02.2025

Принята к публикации 18.02.2025

Аннотация

Цель – характеристики андезита, минерала вулканического происхождения по структуре и химическому составу близкого к лунному реголиту, в условиях ударного сжатия при скоростях нагружения до 800 м/с.

Процедура и методы. Плоские образцы андезита подвергнуты одномерному удару ударником, получившим ускорение в пневматической метательной установке. Методом лазерной доплеровской интерферометрии измерены профили скорости свободной поверхности образцов при выходе на неё волны ударного сжатия в диапазоне давлений от 0,5 до 1,9 ГПа. Измерено время прохождения волны сжатия в образцах заданной толщины.

Результаты. Впервые получены адиабаты Гюгонио для сыпучих образцов (со средним размером зерна (80–90) микрон, с размерами зёрен от 400 микрон до нескольких сотен нанометров) и монолитного андезита при относительно малых скоростях удара от 250 до 800 м/с. Получены профили скорости поверхности на границе 'образец – диагностическое окно' в момент выхода волны ударного сжатия. Проведено сравнение с аналогом марсианского реголита. Обнаружено, что при массовых скоростях менее 350 м/с возникает область адиабатического сжатия, в которой имеет место только деформация вещества без фазовых переходов в нём. При давлении 1,9 ГПа обнаружен предвестник, что характерно для области упругого деформирования.

Теоретическая и/или практическая значимость. Полученные результаты важны для разработки инженерных и численных моделей свойств лунных грунтов при взаимодействии с ними спускаемых аппаратов в предстоящих экспедициях.

Ключевые слова: аналог лунного грунта, андезит, пластическая деформация, предвестник, ударная адиабата, профиль скорости, VISAR

Благодарности и источники финансирования. Исследование было выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание № 075-01129-23-00).

Для цитирования.

Зиборов В. С., Ростиллов Т. А., Дольников Г. Г. Исследование структуры ударных волн в сыпучем и монолитном андезите методом лазерной интерферометрии // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 2. С.55–65. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-55-65>

Original research article

INVESTIGATION OF THE STRUCTURE OF SHOCK WAVES IN LOOSE AND MONOLITHIC ANDESITE BY LASER INTERFEROMETRY

V. Ziborov¹, T. Rostilov¹, G. Dolnikov²*

¹ *Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

² *Space Research Institute, Moscow, Russian Federation*

Received by the editorial office 05.02.2025

Accepted for publication 18.02.2025

Abstract

Aim is to characterize andesite, a volcanic mineral similar in structure and chemical composition to lunar regolith, under shock compression conditions at loading speeds of up to 800 m/s.

Methodology. Flat andesite samples were subjected to a one-dimensional impact by a striker accelerated in a pneumatic throwing device. The laser Doppler interferometry method was used to measure the velocity profiles of the free surface of the samples when a shock compression wave was released onto it in the pressure range from 0.5 to 1.9 GPa. The time of compression wave passage in samples of a given thickness was measured.

Results. For the first time, Hugoniot adiabats were obtained for bulk samples (with an average grain size of (80–90) microns, with grain sizes from 400 microns to several hundred nanometers) and monolithic andesite at relatively low impact velocities from 250 to 800 m/s.

The surface velocity profiles at the 'sample – diagnostic window' boundary at the moment of the shock compression wave exit were obtained. A comparison with the Martian regolith analogue was made. It has been found that at mass velocities less than 350 m/s, a region of adiabatic compression occurs, in which only deformation of the substance without phase transitions in it takes place. At a pressure of 1.9 GPa, an elastic precursor was detected, which is typical for the region of elastic deformation.

Research implications. The results obtained are important for the development of engineering and numerical models of the properties of lunar soils in the interaction of landers with them in upcoming expeditions.

Keywords: analog of lunar soil, andesite, plastic deformation, precursor, shock adiabatic, velocity profile, VISAR

Acknowledgments. The study was carried out with the support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (state assignment No. 075-01129-23-00).

For citation.

Ziborov, V. S., Rostilov, T. A., & Dolnikov, G. G. (2025). Investigation of the structure of shock waves in loose and monolithic andesite by laser interferometry. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2, pp.55–65. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-55-65>

Введение

Широкий интерес к изучению лунного грунта связан с возможностью получить фундаментальные знания о происхождении Вселенной, а также с предполагаемым наличием ископаемых ресурсов в количестве и виде на Земле недоступном или нецелесообразном для разработки в силу экологических причин. Так, по некоторым оценкам [1] содержание редкого на Земле изотопа He^3 хватило бы для обеспечения топливом термоядерных электростанций человечества на всю обозримую перспективу. Хотя имеются образцы лунного реголита, доставленные советскими и китайскими автоматическими станциями (сотни граммов), американскими экспедициями «Аполлон» (килограммы), для всесторонних исследований реголита недостаточно, учитывая разрушение материала в экспериментах с распространением ударных волн. В этой связи развивается моделирование его свойств [2; 3], исследуются вулканические породы, близкие по химическому составу и структуре. По имеющимся данным поверхность Луны выстлана монолитным реголитом и продуктами его разрушения метеоритами. Преобладающий размер песка (0,05-0,8) мм [1].

Целью данной работы является экспериментальное исследование свойств одного из аналогов лунного реголита, андезита, в наименее изученной области, области относительно малых скоростей удара – (250-800) м/с, в которой размеры, пористость и иные физические параметры сыпучего андезита важны для расчёта конструкций и режимов прилунения спускаемых аппаратов.

Приготовление образцов

Образцы изготавливались в виде таблеток, высотой 2 мм и более, диаметром 21 мм. Сыпучий андезит был получен из кусков, измельчённых на шаровой мельнице до размеров в десятки – сотни микрометров (рис. 1). Размолотый андезит был просеян через калиброванные сита и тонкими слоями методом выпаривания наносился в полость сборки известных размеров (рис. 2).

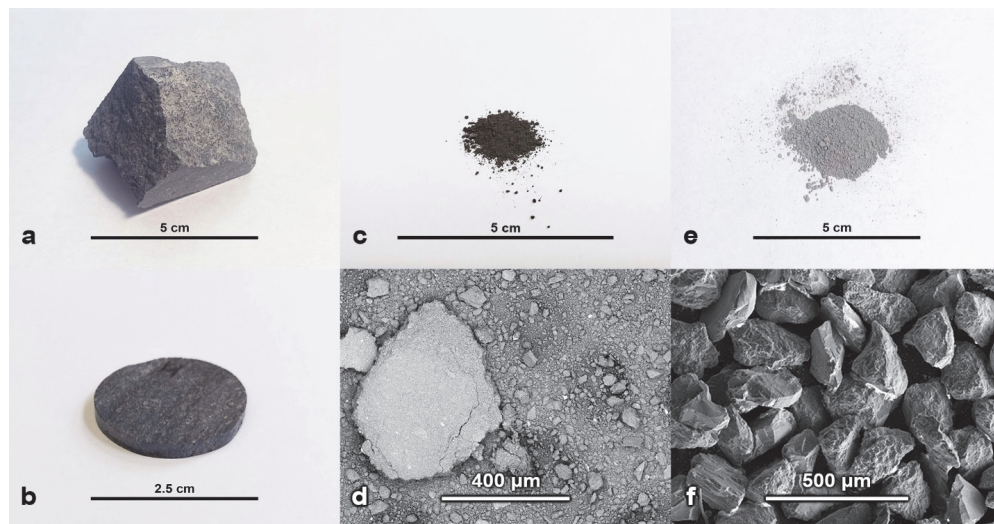


Рис. 1 / Fig. 1. Андезит на разных стадиях измельчения /
Andesite at different stages of grinding

Источник: данные авторов

Монолитный андезит разрезался на пластины заданной толщины. Максимальная разница высоты таблетки образца, измеренной на краях, не превышала 2 мкм. Образцы сыпучих фракций были двух типов: с частицами от ~10 до 200 мкм, средним размером частицы 80-90 мкм и начальной плотностью 1,34 г/см³ и с частицами от нескольких сотен нанометров до 400 мкм и начальной плотностью 1,16 г/см³. Типичная сборка, внутри которой помещался образец, показана на рис. 2. В случае сыпучих фракций лицевая поверхность образца совмещена с внутренней поверхностью экрана из алюминиевого сплава Д16Т толщиной 2 мм. Плоскость тыльной стороны образца совмещена с плоскостью алюминиевой фольги толщиной 7 мкм, наклеенной на окно из оргстекла. Для образцов из монолита экран не применялся, в ряде экспериментов использовалось водяное окно. Алюминиевая фольга наклеивалась на тыльную поверхность образца.

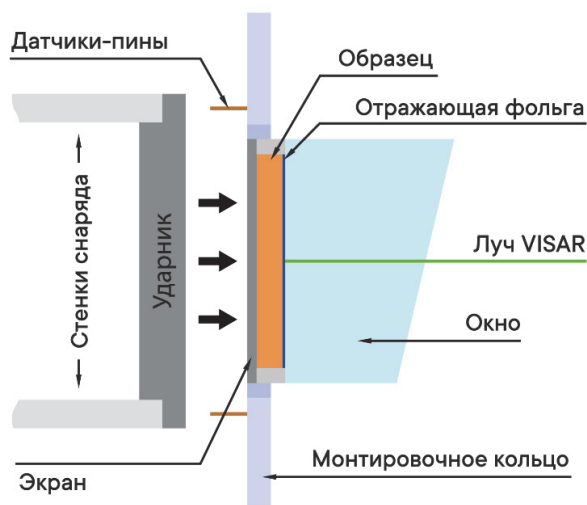


Рис. 2 / Fig. 2. Схема эксперимента со сборкой образца сыпучего андезита /
Experimental scheme for assembling a sample of loose andesite

Источник: составлено авторами

Химический состав реголита (автоматическая станция «Луна-16») и реголита (экспедиция «Аполлон-11») различаются между собой, эти различия соизмеримы с их отличием от состава андезита (рис. 3). В реголите присутствует окись железа, в андезите Fe_2O_3 [4].

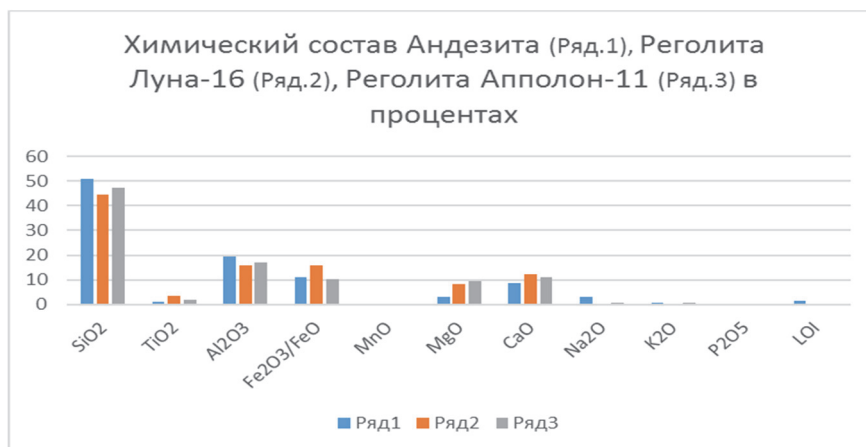


Рис. 3 / Fig. 3. Диаграмма сравнения химического состава андезита и лунного реголита, доставленного экспедициями «Луна-16» и «Аполлон-11» / Comparison diagram of the chemical composition of andesite and lunar regolith delivered by the Luna-16 and Apollo-11 expeditions.

Источник: [4]

Методика измерений

Исследования проведены на установке «Стрела-2М», газовой пушке калибром 57 мм. Плоский ударник из алюминиевого сплава Д16Т толщиной 10 мм ускорялся потоком сжатого газа до скоростей от 250 до 800 м/с в стволе пушки. В измерительной камере вблизи среза ствола он взаимодействовал с плоскостью сборки, в которую заподлицо был вмонтирован образец. Ствол пушки, камера измерений и приёмная камера вакууммировались. Остаточное давление газа не превышало 1 мм рт. ст. Скорость ударника определялась с помощью датчиков контактного типа по известному расстоянию между парами датчиков и измеренному времени их замыкания [5]. Использование пар датчиков, установленных перпендикулярно плоскости образца во взаимно перпендикулярных плоскостях, позволяло определить ещё и угол перекоса ударника относительно образца. Точность измерения скорости не хуже 1%.

Профили скорости границы «образец-окно» для сыпучего андезита и свободной поверхности для монолитного измерены с использованием неравноплечего доплеровского интерферометра типа VISAR, имеющего временное разрешение 1 нс. Более подробно метод и способ получения профилей из осциллограмм интерферометра дан в [5; 6]. В общем случае профили имеют сложную форму, которая зависят от множества параметров, в частности, вязких свойств материала, его неоднородности, пористости и т.д. [7, 8].

Результаты измерений

Характерные профили скорости, полученные в экспериментах с монолитным и сыпучим андезитом, показаны на рис. 5 и 6. Профили ударных волн в неоднородных материалах имеют сложную структуру [5–8]. Выделяют волну-предвестник и волну пластической деформации (пластическую ударную волну).

Хорошо видно, что в сыпучих образцах волна упругого предвестника не наблюдается. В монолитном андезите предвестник присутствует, что позволяет сделать вывод о наличии диапазона давлений ударного сжатия, при которых андезит сохраняет упругость, не разрушается. Крутизна нарастания профиля скорости в андезите больше, чем в аналоге марсианского реголита, что, по-видимому, связано с различием в структуре сравниваемых материалов. Для детального анализа требуются измерения в образцах разной толщины и более широком диапазоне давлений.

Адиабата как зависимость максимальной скорости поверхности от массовой скорости показана на рис. 7, там же приведены имеющиеся литературные данные (работы Т. Дж. Аренса [9; 11; 12], В. С. Зиборова [10]). Точки, полученные в данной работе, лежат в диапазоне малых скоростей удара, ранее не исследованных.

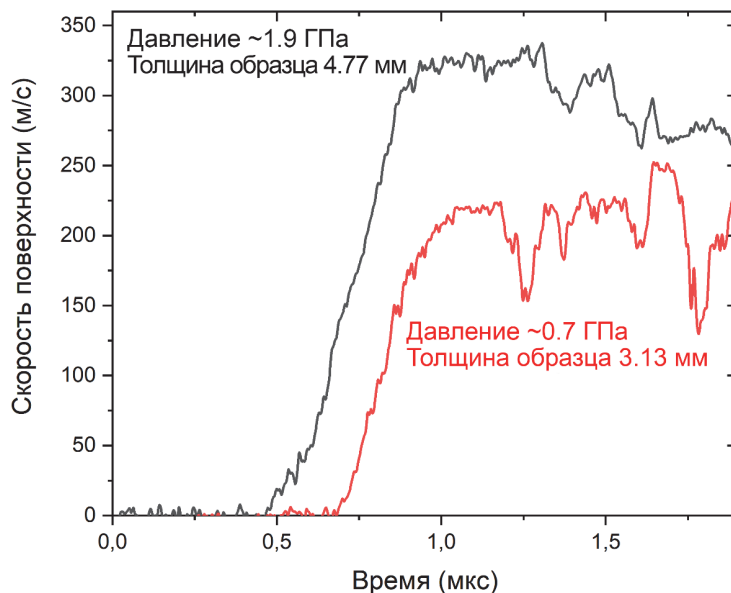


Рис. 5 / Fig. 5. Профили скорости границы монолитного андезита и водяного окна при выходе на неё ударной волны / Velocity profiles of the solid andesite – water window interface at the moment of shock wave arrival

Источник: составлено авторами

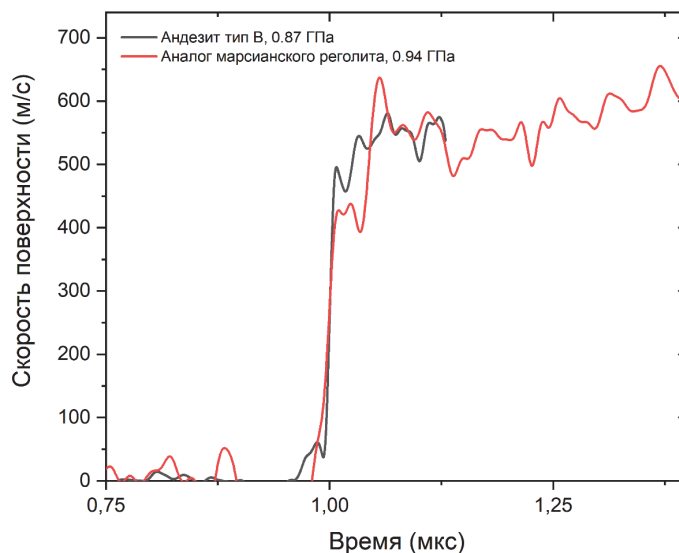


Рис. 6 / Fig. 6 Профили массовой скорости молотого андезита и аналога марсианского реголита / Particle velocity profiles of powdered andesite and Martian regolith analog

Источник: составлено авторами

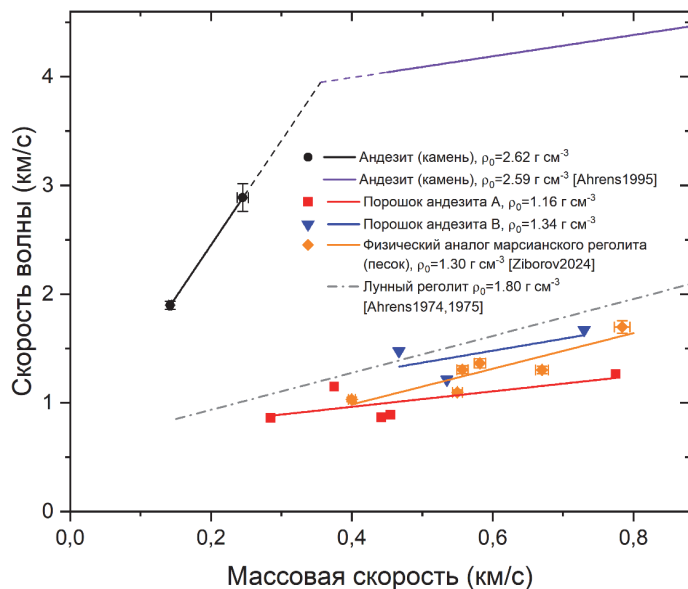


Рис. 7 / Fig. 7. Ударные адиабаты / Impact Adiabats

Источник: составлено авторами, в т. ч. с использованием [9–12].

Адиабаты отличающихся размером фракций сыпучего андезита имеют одинаковый наклон, совпадающий с данными из [9], но имеют разное положение по оси ординат: чем меньше начальная плотность материала (т.е. чем больше начальная пористость), тем ниже положение адиабаты по оси ординат. По-видимому, это связано с тем, что значительная часть энергии удара идёт на уплотнение пор или разрушение частиц. Большой угол наклона адиабаты в монолитном андезите при массовых скоростях меньше 350 м/с, вероятно, показывает, что в этой области не происходит фазовых превращений компонентов материала (т.е. происходит только деформация вещества). Область, где начинаются фазовые превращения, инициированные ударным сжатием, начинается после 350 м/с [9].

Заключение

Проведённое исследование позволило дополнить имеющиеся в литературе данные о свойствах андезита, одного из аналогов некоторых типов лунного грунта, в условиях ударного сжатия в области малых скоростей удара. Показано, что при давлении ударного сжатия 1.9 ГПа на профиле ударной волны монолитного андезита, вероятно, формируется упругий предвестник. В координатах массовая скорость – скорость ударной волны ударные адиабаты образцов дробленого андезита лежат ниже, чем адиабата сплошного андезита, что в первую очередь связано с затратой энергии удара на закрытие пор. При этом адиабата дробленого андезита с более узким распределением частиц и

большей насыпной плотностью лежит выше адиабаты дробленого андезита другого типа, что согласуется с известными сведениями по пористым средам.

ЛИТЕРАТУРА

1. Игнатова А. М., Игнатов М. Н. Использование ресурсов реголита для освоения лунной поверхности // Международный журнал экспериментального образования. 2013. № 11-2. С. 101–110.
2. Ломоносов И. В. Уравнение состояния реголита и хондрита при высоких давлениях // Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки. 2024. Т. 515. № 1. С. 9–12. DOI: 10.31857/S2686740024020023.
3. Preparation and characterization of a specialized lunar regolith simulant for use in lunar low gravity simulation / Ruilin Li, Guoqing Zhou, Kang Yan, Jun Chen, Daqing Chen, Shangyue Cai, Pin-Qiang Mo // International Journal of Mining Science and Technology. 2022. Vol. 32. Iss. 1. P. 1–15. DOI: 10.1016/j.ijmst.2021.09.003.
4. Chemical features of the Luna 16 regolith sample / N. J. Hubbard, N. E. Nyquist, J. M. Rhodes, B. M. Bansal, H. Wiesmann, S. E. Church // Earth and Planetary Science Letters. 1972. Vol. 13. Iss. 2. P. 423–428. DOI: 10.1016/0012-821X(72)90119-7.
5. Зиборов В. С., Канель Г. И., Ростилев Т. А. Экспериментальное исследование характера деформации сферопластиков при ударном сжатии // Физика горения и взрыва. 2020. Т. 56. № 2. С. 124–129. DOI: 10.15372/FGV20200215.
6. Barker L. M., Hollenbach R. E. Laser interferometer for measuring high velocities of any reflecting surface // Journal of Applied Physics. 1972. Vol. 43. Iss. 11. P. 4669–4675. DOI: 10.1063/1.1660986.
7. Медведев А. Б., Трунин Р. Ф. Ударное сжатие пористых металлов и силикатов // Успехи физических наук. 2012. Т. 182. № 8. С. 829–846. DOI: 10.3367/UFNr.0182.201208b.0829.
8. Effect of porosity on rapid dynamic compaction of nickel nanopowder / T. Rostilov, V. Ziborov, A. Dolgoborodov, M. Kuskov // Physical Chemistry Chemical Physics. 2024. Vol. 26. Iss. 2. P. 848–855. DOI: 10.1039/D3CP04985J.
9. Ahrens T. J., Johnson M. L. Shock Wave Data for Minerals // Mineral Physics & Crystallography: A Handbook of Physical Constants. Vol. 2 / ed. T. J. Ahrens. Washington DC: American Geophysical Union, 1995. P. 143–184 (Series: AGU Reference Shelf). DOI: 10.1029/RF002p0143.
10. Impact response of physical analog of Martian regolith / V. Ziborov, T. Rostilov, E. Kronrod, I. Kuznetsov, G. Dolnikov // International Journal of Impact Engineering. 2024. Vol. 188. Article no. 104949. DOI: 10.1016/j.ijimpeng.2024.104949.
11. Ahrens T. J., Cole D. M. Shock compression and adiabatic release of lunar fines from Apollo 17 // Proceedings of Fifth Lunar Science Conference (Houston, Tex., March 18–22, 1974). Vol. 3. New York: Pergamon Press, Inc., 1974. P. 2333–2345.
12. Ahrens T. J. Compaction by impact of unconsolidated lunar fines // Moon. 1975. Vol. 14. P. 291–299.

REFERENCES

1. Ignatova, A. M. & Ignatov, M. N. (2013). Use of resources for regolith exploration of the lunar surface. In: *International Journal of Experimental Education*, 11-2, 101–110 (in Russ.).
2. Lomonosov, I. V. (2024). Equations of state for regolith and chondrite at high pressure. In: *Doklady Physics*, 515 (1), 9–12. DOI: 10.31857/S2686740024020023 (in Russ.).
3. Li, Ruilin, Zhou, Guoqing, Yan, Kang, Chen, Jun, Chen, Daqing, Cai, Shangyue & Mo, Pin- Qiang (2022). Preparation and characterization of a specialized lunar regolith simulant for use in lunar low gravity simulation. In: *International Journal of Mining Science and Technology*, 32 (1), 1–15. DOI: 10.1016/j.ijmst.2021.09.003.
4. Hubbard, N. J. Nyquist, E. N., Rhodes, J. M., Bansal, B. M., Wiesmann, H. & Church, S. E. (1972). Chemical features of the Luna 16 regolith sample. In: *Earth and Planetary Science Letters*, 13 (2), 423–428. DOI: 10.1016/0012-821X(72)90119-7.
5. Ziborov, V. S., Kanel', G. I. & Rostilov, T. A. (2020). Experimental Study of deformation of spheroplastics under shock compression. In: *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 56 (2), 124–129. DOI: 10.15372/FGV20200215 (in Russ.).
6. Barker, L. M. & Hollenbach, R. E. (1972). Laser interferometer for measuring high velocities of any reflecting surface. In: *Journal of Applied Physics*, 43 (11), 4669–4675. DOI: 10.1063/1.1660986.
7. Medvedev, A. B. & Trunin, R. F. (2012). Shock compression of porous metals and silicates. In: *Physics-USpekhi (Advances in Physical Sciences)*, 182 (8), 829–846. DOI: 10.3367/UFNr.0182.201208b.0829 (in Russ.).
8. Rostilov, T., Ziborov, V., Dolgoborodov, A. & Kuskov, M. (2024). Effect of porosity on rapid dynamic compaction of nickel nanopowder. In: *Physical Chemistry Chemical Physics*, 26 (2), 848–855. DOI: 10.1039/D3CP04985J.
9. Ahrens, T. J. & Johnson, M. L. (1995). Shock Wave Data for Minerals. In: Ahrens, T. J. (ed.). *Mineral Physics & Crystallography: A Handbook of Physical Constants. Vol. 2*. Washington DC: American Geophysical Union, pp. 143–184 (Series: AGU Reference Shelf). DOI: 10.1029/RF002p0143.
10. Ziborov, V., Rostilov, T., Kronrod, E., Kuznetsov, I. & Dolnikov G. (2024). Impact response of physical analog of Martian regolith. In: *International Journal of Impact Engineering*, 188, article no. 104949. DOI: 10.1016/j.ijimpeng.2024.104949.
11. Ahrens, T. J. & Cole, D. M. (1974). Shock compression and adiabatic release of lunar fines from Apollo 17. In: *Proceedings of Fifth Lunar Science Conference (Houston, Tex., March 18-22, 1974). Vol. 3*. New York: Pergamon Press, Inc., pp. 2333–2345.
12. Ahrens, T. J. (1975). Compaction by impact of unconsolidated lunar fines. In: *Moon*, 14, 291–299.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Зиборов Вадим Серафимович (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Лаборатории № 6.2. – ударно-волновых воздействий Объединённого института высоких температур Российской академии наук;
e-mail: ziborov.vs@yandex.ru

Ростиллов Тимофей Андреевич (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник Лаборатории № 6.2. – ударно-волновых воздействий Объединённого института высоких температур Российской академии наук;
<https://orcid.org/0000-0003-1175-2374>; e-mail: t.rostilov@yandex.ru

Дольников Геннадий Геннадиевич (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, ведущий инженер отдела физики планет и малых тел Солнечной системы Института космических исследований Российской академии наук;
<https://orcid.org/0000-0003-0001-7462>; e-mail: dolnikov@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Vadim S. Ziborov (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher; Laboratory No. 6.2. – Shock Wave Effects, Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences;
e-mail: ziborov.vs@yandex.ru

Timofei A. Rostilov (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Research Assistant, Laboratory No. 6.2. – Shock Wave Effects, Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences;
<https://orcid.org/0000-0003-1175-2374>; e-mail: t.rostilov@yandex.ru

Gennadiy Gen. Dolnikov (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Leading Engineer, Department of Physics of Planets and Small Bodies of the Solar System, Space Research Institute;
<https://orcid.org/0000-0003-0001-7462>; e-mail: dolnikov@mail.ru

Научная статья

УДК 535.1 и 510.6

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-2-66-73

ПРИМЕНЕНИЕ ЦИФРОВЫХ И КВАНТОВЫХ АЛГОРИТМОВ В МОДЕЛИ НЕЧЁТКОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИТУАЦИИ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ РИСКАМИ ИНВЕСТИРОВАНИЯ

Титов Е. К.

Независимый исследователь, г. Москва, Российская Федерация

e-mail: work_evgeniy@mail.ru

Поступила в редакцию 25.02.2025

Принята к публикации 11.03.2025

Аннотация

Цель: дать общее представление о сравнении методов и алгоритмов для принятия решения в нечёткой информационной ситуации при управлении рисками.

Процедуры и методы. В современном мире с существенным скачком развития информационных технологий и ростом объёмов информации появляются новые средства и методы для инвестирования, что в свою очередь увеличивает количество ситуаций с повышенными рисками. Такие ситуации требуют современных и своевременных решений. Алгоритмы ситуационной обработки информации помогают оптимизировать количество таких ситуаций и свести их к минимуму. А для обработанного объёма рискованных ситуаций могут быть использованы как классические методы передачи информации, так и методы передачи и обработки информации с применением квантовых технологий.

Результаты. Представлены цифровые и квантовые методы передачи и обработки информации. Описаны достоинства и недостатки при работе с ними.

Теоретическая и/или практическая значимость. Описанные методы и алгоритмы могут быть применены и использованы в различных сферах экономики при работе с повышенными рисками их прогнозированием и предупреждением.

Ключевые слова: риски, информационная ситуация, квантование, манипуляция, квантовая чувствительность, сцепленное состояние

Для цитирования.

Титов Е. К. Применение цифровых и квантовых алгоритмов в модели нечёткой информационной ситуации для управления рисками инвестирования // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 2. С. 66–73. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-66-73>

Original research article

APPLICATION OF DIGITAL AND QUANTUM ALGORITHMS IN FUZZY INFORMATION SITUATION MODEL FOR INVESTMENT RISK MANAGEMENT

E. Titov

Independent researcher, Moscow, Russian Federation

e-mail: work_evgeniy@mail.ru

Received by the editorial office 25.02.2025

Accepted for publication 11.03.2025

Abstract

Aim is to provide a general idea of the comparison of methods and algorithms for decision-making in a fuzzy information situation in risk management.

Methodology. In the modern world, with a significant jump in the development of information technology and a significant increase in the volume of information, new means and methods for investing appear which in turn increases the number of situations with increased risks. Such situations require modern and timely solutions. Situational information processing algorithms help optimize the number of such situations and minimize them. And for the processed volume of risk situations, both classical methods of transmitting information and methods of transmitting and processing information using quantum technologies can be used.

Results. Digital and quantum methods of information transmission and processing are presented. Advantages and disadvantages when working with them are described.

Research implications. The described methods and algorithms can be applied and used in various spheres of the economy when working with increased risks of their forecasting and prevention.

Keywords: risks, information situation, quantization, manipulation, quantum sensitivity, coupled state

For citation.

Titov, E. K. (2025). Application of digital and quantum algorithms in fuzzy information situation model for investment risk management. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2, pp. 66–73. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-2-66-73>

Введение

Риски при инвестировании могут быть известными, неизвестными или непостижимыми. Известные риски – это риски, о которых есть какая-либо информация, если они явно не являются рисками, а могут быть открытыми вопросами. Неизвестные риски – это те, которые будут выявлены (т. е. станут известны), если появилась возможность получить не явную или явную информацию. Непостижимые риски – это те, которые даже в принципе никто не

мог предвидеть. Поэтому эти риски, потенциально критические для успеха инвестирования, выходят за рамки любого метода идентификации рисков. Некоторые из известных рисков уже были идентифицированы и зафиксированы. Основное внимание метода идентификации рисков, описанного в работе, сосредоточено на рисках, которые известны, но не идентифицированы и не зафиксированы, и на неизвестных рисках [1].

Модель нечёткой информационной ситуации при прогнозировании рисков

Для выявления ситуаций, связанных с повышенными рисками, можно использовать имитационные ситуационные модели, которые достаточно точно воспроизводят логическую схему и временную динамику поведения изучаемого объекта. Как правило, они представляют собой либо ситуационный алгоритм поведения объекта, либо исполняющийся в реальном времени программный код, что даёт более прогнозируемый и управляемый результат при исследовании. Однако наименее прогнозируемыми и более сложными для изучения являются стохастические ситуационные процессы, которые могут быть предсказаны или спрогнозированы в меньшей степени, что ведёт к повышению рисков [2; 3].

Чем сложнее и обширнее методы, применяемые для построения моделируемой ситуации, тем ниже количество рисков, с которыми впоследствии предстоит работать.

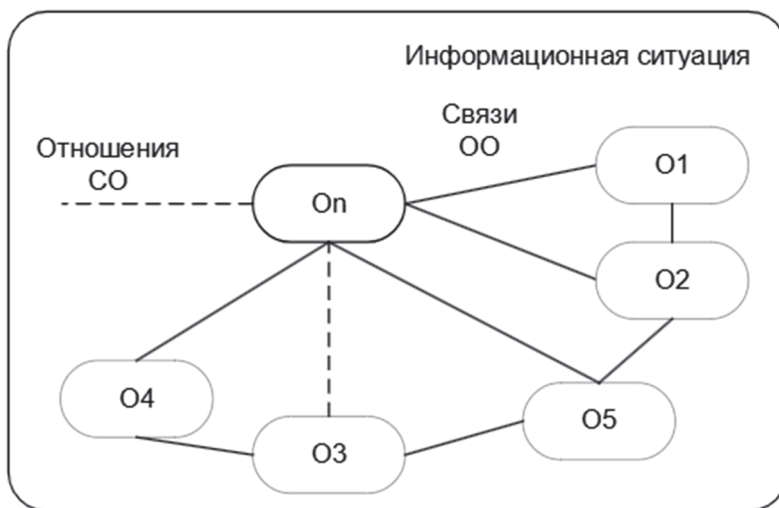


Рис. 1 / Fig. 1. Модель информационной ситуации / Model of information situation

Источник: Составлено автором.

На рис. 1 модель информационной ситуации представлена как объект исследования. Реальные ситуации, в которых имеет место нечёткость и параметры являются нечёткими¹, могут быть определены как нечёткие информационные ситуации. С исследованием модели такой информационной ситуации часто связаны условия поведения объекта, развития явления или процесса или условия решения задачи. В случае с инвестированием решением будет являться идентификация и группировка рисков [2].

Матрица рисков

Алгоритм группировки выявленных рисков может быть представлен обычным матричным видом, $A_{m \times n}$, где m – идентифицированные риски, а n – методы и алгоритмы работы с ними.

Матрица пересечения идентифицированных рисков с алгоритмами и методами работы с ними может давать как однозначное, так и комплексное решение для дальнейшей работы с ними. В этом случае ключевым фактором является своевременность и точность передаваемой информации об идентифицированных рисках и выработанных алгоритмах и методах для их устранения или предупреждения. Методы передачи данных могут быть использованы как цифровые, так и оптические. Каждый из них имеет свои преимущества и недостатки. Рассмотрим оба варианта.

Методы и алгоритмы передачи данных в различных ситуациях

При использовании беспроводных каналов передачи данных возникают недостатки, связанные с искажением передаваемых данных при кодировании и декодировании сигнала такими методами, как модуляция, дискретизация, квантование. Эти методы несут в себе усложнение схемы передачи данных и её постоянное преобразование, которое, не смотря на развитие новых технологий и методов извлечения данных, так или иначе ведёт к потере части передаваемой информации. Так, например, при использовании беспроводной связи при квантовании сигнала необходимо учитывать погрешность в половину кванта. А при передаче дискретной информации посредством модуляции сигнала информационные уровни кодируют изменением амплитуды, частоты или фазы. Для передачи бинарной информации значениям единицы и ноля соответствуют противоположные фазовые состояния несущей частоты. Наиболее распространённым методом манипуляции является квадратурно-фазовая манипуляция (QPSK). Недостатком её использования является скачок фазы на 180° градусов.

Этой проблемы можно избежать при использовании амплитудно-фазовой манипуляции при одновременном применении фазовой манипуляции и амплитудной модуляции. Подобную модуляцию можно назвать многоуровневой.

¹ Цветков В. Я. Развитие технологий управления // Государственный советник. 2015. № 4 (12). С. 8.

Пример амплитудно-фазовой модуляции представлен на рис. 2.

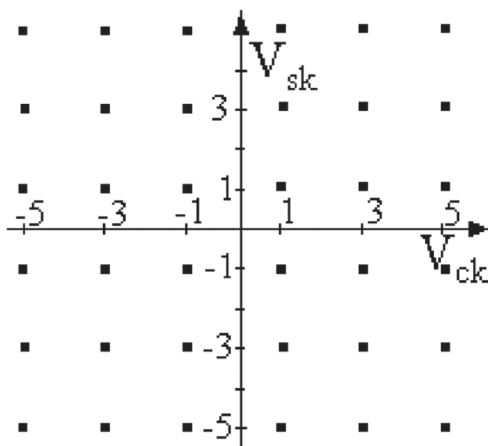


Рис. 2 / Fig. 2. Пример амплитудно-фазовой модуляции /
Example of amplitude-phase modulation

Источник: [4, с. 175]

Преимуществом такого способа модуляции является значительное повышение скорости передачи информации, которое можно записать как отношение

$$K = \frac{\text{Скорость передачи данных}}{\text{Требуемая полоса частот}}$$

где K – спектральная эффективность [4].

Оптоволоконные соединения гарантируют минимум шумов и высокую безопасность, обусловленную невозможностью сделать отвод. Вероятность ошибки при передаче данных составляет 10^{-10} , что в большинстве случаев делает контроль целостности сообщений ненужным. При использовании мультимодового вида волокон снижается дисперсия времени распространения и вносятся меньшие искажения формы сигнала. Придавая световым импульсам обратный гиперболический косинус, эффекты дисперсии можно полностью исключить. Такие импульсы называют солитонами. Также снижение потерь можно получить, если диаметр волокна больше диаметра источника света. Чувствительность приёмника задаётся квантовой эффективностью, которая характеризует отношение числа первичных электронно-дырочных пар к числу падающих на детектор фотонов. Этот параметр часто выражается в процентах (реже в амперах на люмен). Так, если на каждые 100 фотонов приходится 60 пар

электрон – дырка, то квантовая эффективность равна 60%. Чувствительность фотодетектора R может быть вычислена на основе квантовой чувствительности:

$$R = (neI)/hc,$$

где e – заряд электрона, h – постоянная Планка, c – скорость света, l – длина волны, а n – квантовая чувствительность [5].

Время нарастания фотодиода ограничивает быстродействие системы. Немалую роль играет и уровень шумов на входе приёмника. При этом световой импульс должен нести достаточно энергии (заметно больше уровня шума), чтобы обеспечить низкий уровень ошибок.

В таком случае при анализе одномодового режима счёта фотонов, имеющего место при условии малости времени одиночного измерения числа фотонов по сравнению с временем когерентности поступающего на вход усилителя излучения, $T \ll t_{\text{coh}}$. Также предполагается, что площадь фотодетектора меньше площади пространственной когерентности излучения $S \ll S_{\text{coh}}$. Таким образом, распределение $p(m, T)$ фотоэлектронов многоатомного широкополосного фотодетектора для времени измерения T может иметь вид:

$$p(m, T) = \int P(\alpha) \frac{(\epsilon T |\alpha|^2)^m}{m!} \exp(-\epsilon T |\alpha|^2) d^2\alpha,$$

При условии, что квантовая эффективность фотодетектора удовлетворяет соотношению $0 < \eta < 1$, то после преобразования получим соотношение сигнал/шум фотодетектора в виде выражения:

$$\mathfrak{R} = \frac{\langle n_a^2 \rangle}{(1 - \eta)\eta^{-1} \langle n_a \rangle + \langle \Delta n_a^2 \rangle} \quad [6].$$

Одновременно с выбором канала передачи данных можно увеличить плотность потока передаваемых данных, для этого предлагается использовать сверхплотное кодирование, основанное на сцепленном состоянии. Для этого предположим, что передатчик является объектом А, а приёмник объектом Б, находящимися в сцепленном состоянии, тогда каждый из объектов будет представлять из себя q -бит. Известно, что максимальное количество информации переданное от А к В в классическом представлении равно одному биту и получается при кодировании в два ортогональных вектора, например:

$$0 \rightarrow |0\rangle, \quad 1 \rightarrow |1\rangle$$

Протокол «сверхплотного кодирования» позволяет удвоить количество передаваемой информации, имеет в своей основе простой математический факт – все векторы базиса Белла:

$$\begin{aligned} |e_+\rangle &= |00\rangle + |11\rangle, & |e_-\rangle &= |00\rangle - |11\rangle, \\ |h_+\rangle &= |10\rangle + |01\rangle, & |h_-\rangle &= |10\rangle - |01\rangle \end{aligned} \quad [7].$$

Таким образом, вычислительный алгоритм нечёткой ситуации с идентифицированными рисками может иметь различные варианты решений для выбора методов передачи и кодирования информации о наступивших или предполагаемых идентифицированных рисках на начальном уровне.

Выводы

Для решения задачи по идентификации рисков в нечёткой информационной ситуации, а также возможности быстрой передачи информации с минимальными потерями предложены следующие ситуационные методы и алгоритмы:

1. Определение рисков и ответственных за их анализ исполнителей с использованием матрицы $A_{m \times n}$.
2. Определение формата передачи информации в зависимости от имеющихся в доступности средств проводной или беспроводной связи (цифровой, аналоговой, аналогово-цифровой).
3. Метод кодирования и декодирования информации.
4. Алгоритм работы с ошибками при приёме информации своевременно и без искажений исходного передаваемого сообщения.
5. Увеличение плотности передаваемых сообщений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Taxonomy-Based Risk Identification / M. J. Carr, S. L. Konda, I. Monarch, F. Carol Ulrich, C. F. Walke. Pittsburgh, Pennsylvania: Software Engineering Institute, 1993. 90 p.
2. Цветков В. Я., Титов Е. К. Информационная вычислительная ситуация // Славянский форум. 2019. № 4 (26). С. 389–397.
3. Современные проблемы вычислительной математики и математического моделирования: сборник статей к 80-летию акад. Г. И. Марчука: в 2-х томах. Т. 2: Математическое моделирование / отв. ред. В. П. Дымников. М.: Наука, 2005. 405 с.
4. Самойлов А. Г., Самойлов С. А. Устройство генерирования и формирования сигналов: учебное пособие. Владимир: Изд-во Владим. гос. ун-та, 2018. С. 154–180.
5. Семенов А. Ю. Оптоволоконные каналы и беспроводные оптические связи // Семенов А. Ю. Алгоритмы телекоммуникационных сетей. Ч. 1 Алгоритмы и протоколы каналов сетей и передачи данных. М.: ИНТУИТ, 2016. С. 50–67.
6. Козловский А. В. Фотодетектирование слабого светового сигнала в различных квантовых состояниях с использованием оптического усилителя // Квантовая электроника. 2006. Т. 36. № 3. С. 280–286.

7. Холево А. С. К математической теории квантовых каналов связи // Проблемы передачи информации. 1972. Т. 8. № 1. С. 62–71.

REFERENCES

1. Carr, M. J., Konda, S. L., Monarch, I., Carol Ulrich, F. & Walke, C. F. (1993). *Taxonomy-Based Risk Identification*. Pittsburgh, Pennsylvania: Software Engineering Institute.
2. Tsvetkov, V. Ya. & Titov, E. K. (2019). Informational constructions and principles of constructive mathematics. In: *Slavic Forum*, 4 (26), 389–397 (in Russ.).
3. Dymnikov, V. P., ed. (2005). *Modern problems of computational mathematics and mathematical modeling: collection of articles for the 80th anniversary of academician G. I. Marchuk: in 2 volumes. Vol. 2. Mathematical modeling*. Moscow: Nauka publ. (in Russ.)
4. Samoilov, A. G. & Samoilov, S. A. (2018). *Device for generating and forming signals*. Vladimir: Vladimir State University publ., pp. 154–180 (in Russ.).
5. Semenov, A. Yu. (2016). Fiber-optic channels and wireless optical communications. In: Semenov, A. Yu. *Algorithms of telecommunication networks. Part 1 Algorithms and protocols of network channels and data transmission*. Moscow: INTUIT publ., pp. 50–67 (in Russ.).
6. Kozlovskii, A. V. (2006). Photodetection of a weak light signal in various quantum states by using an optical amplifier. In: *Quantum Electronics*, 36 (3), 280–286 (in Russ.).
7. Holevo, A. S. (1972). On the Mathematical Theory of Quantum Communication Channels. In: *Problems of Information Transmission*, 8 (1), 62–71 (in Russ.).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Титов Евгений Константинович (г. Москва) – независимый исследователь;
<https://orcid.org/0000-0002-8423-3439>; e-mail: work_evgeniy@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Evgeny K. Titov (Moscow) – independent researcher;
<https://orcid.org/0000-0002-8423-3439>; e-mail: work_evgeniy@mail.ru



ВЕСТНИК
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

СЕРИЯ: ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА
2025. № 2

Над номером работали:
Ответственный редактор И. А. Потапова
Литературный редактор М. С. Тарасова
Корректор М. С. Тарасова
Компьютерная вёрстка – Д. А. Семина

Адрес редакции:
105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 2, офис 98
тел. (495) 780-09-42 доб. 6101
e-mail: sj@guppros.ru
Сайт: www.physmathmgou.ru

Формат 70x108/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура "Minion Pro".
Тираж 500 экз. Усл. п. л. 4,75, уч.-изд. л. 4.
Подписано в печать: 01.07.2025 г. Дата выхода в свет: 03.07.2025 г. Заказ № 2025/06-18.
Отпечатано в Государственном университете просвещения
105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 2