



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.  
SERIES: PHYSICS AND MATHEMATICS.*

ГИБКАЯ ПЕРЕЗАПИСЫВАЕМАЯ  
ЭЛЕКТРОННАЯ БУМАГА НА ОСНОВЕ  
НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ  
МАТЕРИАЛОВ



НЕЙРОСЕТИ В ОБУЧЕНИИ МАТЕМАТИКЕ

2025 / № 4

ВЕСТНИК  
ГОСУДАРСТВЕННОГО  
УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

ISSN 2949-5083 (print)

2025/ № 4

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)

ISSN 2949-5083 (print)

2025 / № 4

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; Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого; Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы; ООО «Цзинцуй Оптическая Технология» (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](http://www.elibrary.ru)), с августа 2017 г. на платформе Научной электронной библиотеки «КиберЛенинка» ([www.cyberleninka.ru](http://www.cyberleninka.ru)), а также на сайте журнала «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика» ([www.physmathmgou.ru](http://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. – № 4. – 116 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](mailto:sj@guppros.ru); сайт: [www.physmathmgou.ru](http://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 State University of Education; Yaroslav-the-Wise Novgorod State University; Peoples’ Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba; Nanjing Jingcui Optical Technology Co., Ltd., Nanjing, 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](http://www.elibrary.ru)) and “CyberLeninka” (since August 2017; [www.cyberleninka.ru](http://www.cyberleninka.ru)), as well as on the site of “Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics” ([www.physmathmgou.ru](http://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. – № 4. – 116 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](mailto:sj@guppros.ru); site: [www.physmathmgou.ru](http://www.physmathmgou.ru).

# СОДЕРЖАНИЕ

## ФИЗИКА

- Кононенко Н. Е., Симушкина С. В., Чекулаев И. С., Курилов А. Д.* Активация поверхности тонкоплёночных прозрачных электродов для применения в органической оптоэлектронике. . . . . 6
- Полевщиков Д. П., Каишковский А. В.* Метод локального подобию для расчёта аэродинамики при малых сверхзвуковых скоростях полёта . . . 17
- Терешкин Э. В., Терешкина К. Б., Крупянский Ю. Ф.* Молекулярно-динамические расчёты кластеров графена и оксида графена в растворе и у поверхности бактериальных внутриклеточных полимеров . . . . . 42
- Тимохин М. Ю., Бондарь Е. А.* Макроскопические газодинамические приближения локальной неравновесной функции распределения молекул по скоростям. . . . . 59
- Чигринов В. Г., Курилов А. Д., Кудрейко А. А.* Гибкая перезаписываемая электронная бумага на основе наноструктурированных материалов . . . 77

## МАТЕМАТИКА

- Забелина С. Б., Пинчук И. А., Грицькова Л. С., Шаммаи Ирани С. М.* Нейросети в обучении математике . . . . . 88
- Кан И. Д., Зверев Н. А., Давиденко Е. В.* Последовательности со степенными свойствами . . . . . 100

## НАУЧНАЯ ЖИЗНЬ

- Исаев В. И.* Поиск формулы спектрального распределения энергии теплового излучения абсолютно чёрного тела В. А. Михельсоном . . . . 110

# CONTENTS

## PHYSICS

- N. Kononenko, S. Simushkina, I. Chekulaev, A. Kurilov.** Surface Activation of Thin-Film Transparent Electrodes for Application in Organic Optoelectronics. . . . . 6
- D. Polevshchikov, A. Kashkovsky.** Local Similarity Method for Aerodynamics Calculation at Low Supersonic Flight Speed . . . . . 17
- E. Tereshkin, K. Tereshkina, Y. Krupyanskii.** Molecular Dynamics Simulation of Graphene and Graphene Oxide Clusters in Solution and at the Surface of Bacterial Intracellular Polymers . . . . . 42
- M. Timokhin, Ye. Bondar.** Macroscopic Gas-Dynamic Approximations of the Local Nonequilibrium Molecular Velocity Distribution Function . . . . 59
- Chigrinov V. G., Kurilov A. D., Kudreyko A. A.** Flexible Optically Rewritable E-Paper Based on Nanotechnology . . . . . 77

## MATHEMATICS

- S. Zabelina, I. Pinchuk, L. Gritskova, S. Shammai Irani.** Neural Networks in Teaching Mathematics . . . . . 88
- I. Kan, N. Zverev, E. Davidenko.** Sequences with Power-Law Properties. . . 100

## ACADEMIC LIFE

- V. Isaev.** Search by W. A. Michelson for the Formula for the Spectral Distribution of the Blackbody Radiation Energy. . . . . 110

Научная статья

УДК 539.23, 539.612

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-4-6-16

## АКТИВАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ ТОНКОПЛЁНОЧНЫХ ПРОЗРАЧНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ОРГАНИЧЕСКОЙ ОПТОЭЛЕКТРОНИКЕ

*Кононенко Н. Е., Симушкина С. В., Чекулаев И. С., Курилов А. Д.\**

*Государственный университет просвещения, г. Москва, Российская Федерация*

*\*Корреспондирующий автор, e-mail: ad.kurilov@guppros.ru*

*Поступила в редакцию 30.10.2025*

*Принята к публикации 6.11.2025*

### **Аннотация**

**Цель:** разработка воспроизводимого и мягкого метода очистки и активации поверхности прозрачных проводящих электродов (ITO, FTO), который позволяет достичь высокой поверхностной энергии с сохранением морфологии и электрофизических свойств подложки для их последующего применения в органической оптоэлектронике.

**Процедура и методы.** Разработан новый протокол очистки на основе обработки поверхностей в аммиачно-перекисном растворе при кипячении и последующей активации в озоновой камере. Для оценки эффективности метода использовались измерения краевого угла смачивания с последующим расчётом поверхностной энергии, а также анализ морфологии поверхности и её электрофизических характеристик.

**Результаты.** Показано, что разработанный протокол позволяет достичь значений поверхностной энергии  $\sim 70$  мДж/м<sup>2</sup>, что свидетельствует о значительном увеличении гидрофильности и высокой степени очистки. Установлено, что метод не приводит к деградации проводящих слоёв, сохраняя их исходную морфологию и электропроводность, в отличие от традиционных подходов с использованием кислот.

**Теоретическая и/или практическая значимость.** Высокая поверхностная энергия, достигнутая с помощью обработки аммиачно-перекисным раствором, способствует улучшению адгезии и однородности нанесения органических слоёв, что критически важно для повышения эффективности и стабильности OLED, OPV и других гибридных устройств.

**Ключевые слова:** прозрачные проводящие оксиды, очистка поверхности, поверхностная энергия, активация поверхности, органическая оптоэлектроника, адгезия, смачиваемость

**Благодарности и источники финансирования.** Работа выполнена в рамках реализации научно-исследовательского проекта-победителя конкурса на получение гранта Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Государственный университет просвещения» в 2025 году. Авторы также выражают благодарность педагогическому технопарку «Кванториум» имени И. В. Курчатова Государственного университета просвещения за предоставленную возможность использования оборудования, что оказалось крайне важным для проведения данного исследования.

**Для цитирования:**

Активация поверхности тонкоплёночных прозрачных электродов для применения в органической оптоэлектронике / Н. Е. Кононенко, С. В. Симушкина, И. С. Чекулаев, А. Д. Курилов // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 4. С. 6–16. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-6-16>

## Original research article

# SURFACE ACTIVATION OF THIN-FILM TRANSPARENT ELECTRODES FOR APPLICATION IN ORGANIC OPTOELECTRONICS

*N. Kononenko, S. Simushkina, I. Chekulaev, A. Kurilov\**

*Federal State University of Education, Moscow, Russian Federation*

*\*Corresponding author, e-mail: ad.kurilov@guppros.ru*

*Received by the editorial office 30.10.2025*

*Accepted for publication 6.11.2025*

## Abstract

**Aim** is to development of a reproducible and mild method for cleaning and activating the surface of transparent conductive electrodes (ITO, FTO) that enables high surface energy while preserving the substrate's morphology and electrophysical properties for their subsequent application in organic optoelectronics.

**Methodology.** A new cleaning protocol was developed based on treating surfaces in a boiling ammonia–peroxide solution followed by activation in an ozone chamber. To evaluate the method's effectiveness, contact angle measurements were performed followed by surface energy calculations, as well as analysis of surface morphology and its electrophysical characteristics.

**Results.** It is shown that the developed protocol enables achieving surface energy values of up to  $\sim 70$  mJ/m<sup>2</sup>, indicating a significant increase in hydrophilicity and a high degree of cleaning. It has been established that the method does not lead to degradation of the conductive layers, preserving their initial morphology and electrical conductivity, unlike traditional acid-based approaches.

**Research implications.** The high surface energy achieved through ammonia–peroxide solution treatment combined with ozone activation contributes to improved adhesion and uniformity of organic layer deposition, which is critically important for enhancing the efficiency and stability of OLEDs, OPVs, and other hybrid devices.

**Keywords:** transparent conductive oxides, surface cleaning, surface energy, organic optoelectronics, adhesion, wettability

**Acknowledgments:** This work was supported by the grant from the Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education “Federal State University of Education” in 2025, awarded to the winning research project in the competitive grant program. We also extend our gratitude to the Pedagogical Technopark “Kvantorium” named after I. V. Kurchatov at the Federal State University of Education for providing access to their equipment, which was instrumental in conducting this study.

**For citation:**

Kononenko, N. E., Simushkina, S. V., Chekulaev, I. S. & Kurilov, A. D. (2025). Surface activation of thin-film transparent electrodes for application in organic optoelectronics. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 4, pp. 6–16. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-6-16>

## Введение

Современная органическая оптоэлектроника, включающая такие устройства, как светоизлучающие диоды (OLED), фотодетекторы, солнечные элементы (OPV) и жидкокристаллические дисплеи (LCD), продолжает активно развиваться, воплощая перспективы создания гибких, лёгких и экономичных устройств [1]. Одним из ключевых факторов, определяющим эффективность и долговечность этих приборов, является качество нанесения активного органического слоя на прозрачный проводящий электрод.

В качестве проводящих слоёв наиболее широко используются оксиды индия-олова (ITO) [2–4] и оксид олова, допированный фтором (FTO) [5; 6]. Однако их поверхность часто характеризуется недостаточной смачиваемостью и низкой поверхностной энергией, что связано с наличием органических и адсорбированных углеродных загрязнений, полученных в процессе производства и хранения. Это приводит к плохой адгезии органических слоёв, неоднородности их нанесения, образованию дефектов и, как следствие, снижению эффективности устройства.

Для решения этой проблемы применяются различные методы активации и очистки поверхности [7], такие как озонная обработка [8], кислородная плазма [9] и обработка в растворах кислот [10]. Несмотря на определённую эффективность, эти методы имеют ряд ограничений: использование кислотных реагентов чревато взаимодействием с электродами, что ведёт к изменению морфологии и шероховатости вплоть до образования дефектов в слое проводника [11]. Применение же стандартных протоколов с использованием различных органических растворителей (ацетон, изопропиловый спирт, толуол и т. д.) требует их высокой чистоты и продолжительного времени обработки.

В связи с этим разработка воспроизводимого метода очистки и активации поверхности ITO и FTO, при этом не изменяющего структуру проводников, является актуальной задачей. В данной работе мы предлагаем новый протокол, основанный на использовании аммиачно-перекисного раствора (АПР). Этот метод обладает значительным потенциалом благодаря своей эффективности и щадящему воздействию на поверхность проводящего оксида, что позволяет избежать её химической и структурной деградации. Целью нашей работы

является изучение влияния нового протокола очистки плёнок ITO и FTO на основе АПР на свободную энергию поверхности, а также на структурные и электрофизические свойства.

### Материалы и методы

В качестве объектов исследования выбраны коммерческие стёкла с ITO- (900, 350, 180 нм) и FTO-покрытием (190 нм). АПР был подготовлен из концентрированного раствора аммиака (25%), концентрированного раствора перекиси водорода (30%) и деионизированной воды в объёмном соотношении 1:1:5 соответственно.

Стёкла с нанесённым покрытием вносили в мыльный раствор и обрабатывали в течение 10 минут в ультразвуковой ванне. После обработки образцы промывали большим количеством деионизированной воды для удаления остаточных количеств поверхностно-активных веществ. Промытые подложки вносили в свежеприготовленный кипящий АПР и выдерживали в течение 15 минут. После обработки АПР образцы тщательно промывали деионизированной водой для удаления реакционной смеси и высушивали в токе сухого воздуха. Заключительной стадией подготовки являлась обработка подложек в озоновом очистителе (UV-Ozone Cleaner, Osilla) в течение 10 минут для удаления остаточных органических загрязнителей и дополнительной активации поверхности.

Смачиваемость очищенных поверхностей характеризовали путём измерения статического краевого угла смачивания с использованием трёх тестовых жидкостей: деионизированной воды, глицерина и этиленгликоля. Поверхностную энергию и её полярную и дисперсионную компоненты рассчитывали по методу OWRK (Owens-Wendt-Rabel-Kaelble) [12]:

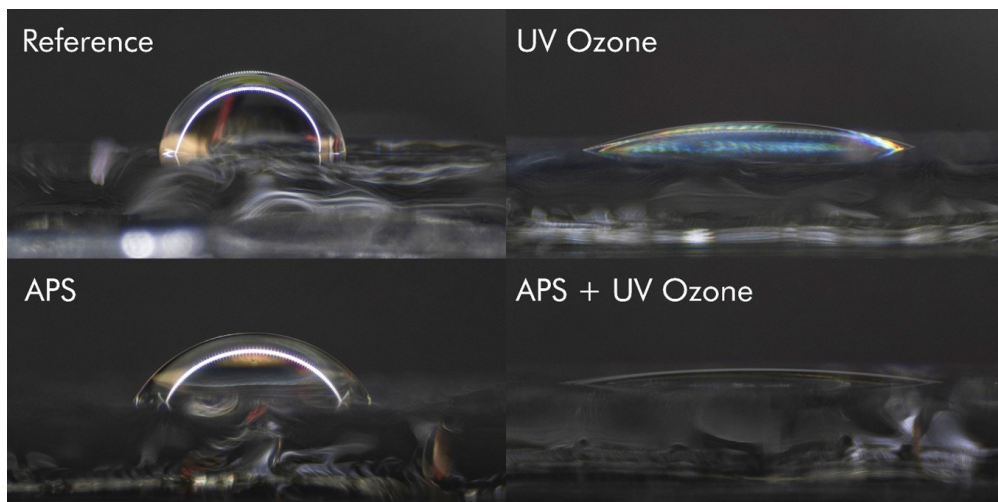
$$\frac{\gamma_l (\cos\theta + 1)}{2\sqrt{\gamma_l^D}} = \sqrt{\gamma_s^P} \frac{\sqrt{\gamma_l^P}}{\sqrt{\gamma_l^D}} + \sqrt{\gamma_s^D}, \quad (1)$$

где  $\gamma_l^D$  и  $\gamma_l^P$  – дисперсионная и полярная составляющая полной энергии поверхностного натяжения жидкости,  $\gamma_s^D$  и  $\gamma_s^P$  – дисперсионная и полярная составляющая полной энергии поверхности исследуемой подложки,  $\gamma_l$  – полная энергия поверхностного натяжения,  $\theta$  – краевой угол смачивания.

Для контроля влияния разработанного протокола на электрофизические свойства проводящих слоёв проведено измерение поверхностного сопротивления до и после обработки с помощью четырёхзондового метода (JG ST2258C, зонд ST2558B-F01 из медно-фосфорного сплава с золотым покрытием). Анализ морфологии поверхности проводился с использованием атомно-силового микроскопа (NT-MDT NEXT II, полуконтактный режим), размер сканируемых областей 5×5 мкм и 50×50 мкм.

## Результаты и обсуждение

Первоочередной задачей исследования была оценка эффективности разработанного АПР-протокола по увеличению поверхностной энергии. Результаты измерения краевых углов смачивания и последующего расчёта по модели OWRK показывают высокую эффективность метода (см. рис. 1).

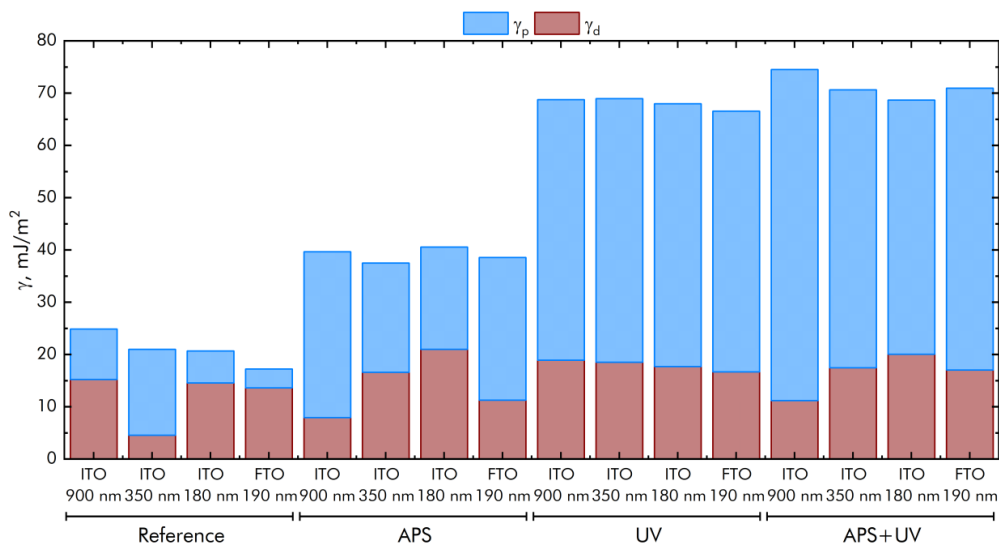


**Рис. 1 / Fig. 1.** Изменение смачиваемости поверхности ИТО (1 Ом/□) водой: до обработки (Reference), после очистки в АПР (APS), после очистки в растворителях и обработки озоном (UV Ozone) и после комбинированного метода обработки в АПР и УФ-озоном (APS+UV Ozone) / Change in the wettability of the ITO surface (1 Ohm/□) with water: before treatment (Reference), after cleaning in APS, after cleaning in solvents and treatment with ozone (UV Ozone) and after a combined method of treatment in APS and UV ozone (APS+UV Ozone).

*Источник:* подготовлено авторами

При обработке неочищенных подложек с прозрачными электродами ( $\sim 17$ – $25$  мДж/м<sup>2</sup>) АПР наблюдается рост поверхностной энергии вдвое (до  $\sim 40$  мДж/м<sup>2</sup>). Как видно из данных, представленных на рис. 1, обработка в АПР и последующая обработка УФ и озоном позволила достичь значения общей поверхностной энергии на уровне  $\sim 70$  мДж/м<sup>2</sup> для обоих типов подложек (ИТО и FTO). Полученные данные сопоставимы с результатами измерения краевого угла смачивания и полной поверхностной энергии для подложек, очищенных стандартным методом с использованием органических растворителей (ацетон, изопропанол) (см. рис. 2).

Рост поверхностной энергии обусловлен, в первую очередь, значительным увеличением полярной компоненты. Это прямо указывает на то, что обработка в АПР приводит не просто к удалению органических загрязнений, но и к химической модификации поверхности за счёт увеличения числа гидроксильных групп (-ОН) на поверхности. Образование гидроксильных групп объясняет резкое повышение гидрофильности и энергии поверхности,



**Рис. 2 / Fig. 2.** Значения полной поверхностной энергии, дисперсионной (красный) и полярной (синий) составляющей энергии покрытий ITO и FTO после очистки / Total surface energy, dispersion (red) and polar (blue) components of energy of ITO and FTO coatings after cleaning

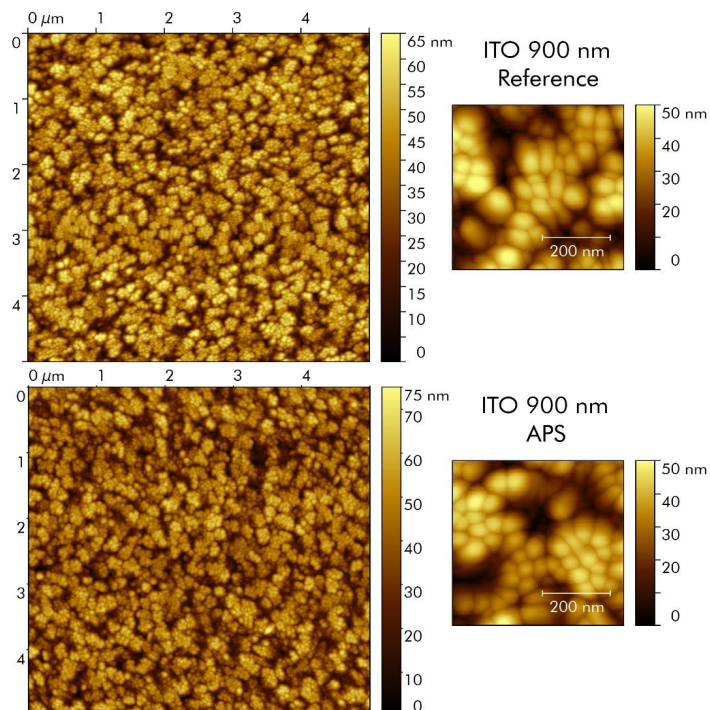
Источник: подготовлено авторами

что особенно важно для последующего однородного нанесения органических слоёв из полярных растворов.

Для подтверждения того, что разработанный метод не разрушает электродное покрытие, был проведён сравнительный анализ морфологии и поверхностного сопротивления подложек до и после обработки.

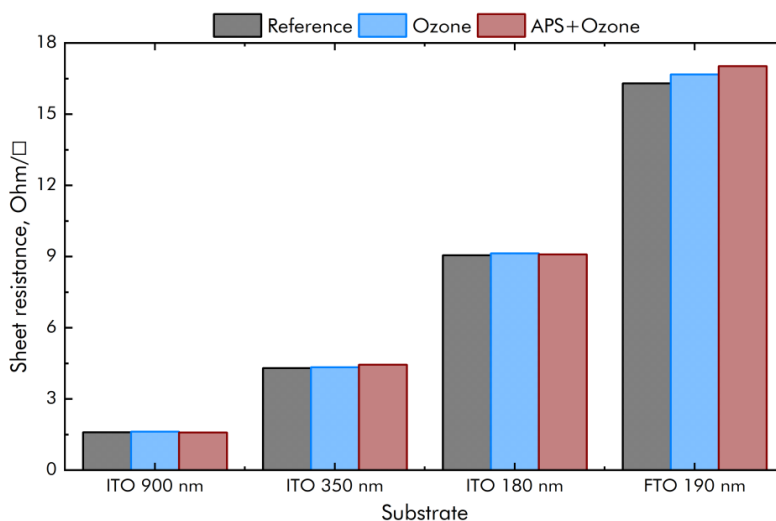
Данные атомно-силовой микроскопии (АСМ) (рис. 3) показывают, что морфологические особенности плёнок для поверхностей ITO и FTO остаются неизменными после АПР-обработки. В отличие от агрессивного кислотного травления, которое приводит к заметному увеличению шероховатости и образованию дефектов, наш протокол сохраняет исходную морфологию проводящего оксида. Таким образом, очистка происходит за счёт химического окисления загрязнений без заметного воздействия на саму подложку.

Результаты измерений удельного поверхностного сопротивления (рис. 4) также не показали статистически значимых изменений. Это свидетельствует о том, что АПР-обработка не вносит дефектов, влияющих на электропроводность плёнок, и не приводит к химическому окислению или восстановлению оксида, что является частым побочным эффектом других методов.



**Рис. 3 / Fig. 3.** АСМ-изображения поверхности ИТО (а) до и (б) после АПР-обработки / AFM images of ITO surface (a) before and (b) after APS processing

*Источник: подготовлено авторами*



**Рис. 4 / Fig. 4.** Поверхностное сопротивление токопроводящих покрытий ИТО и FTO до и после обработки / Surface resistance of ITO and FTO conductive coatings before and after treatment

*Источник: подготовлено авторами*

### Заключение

В данной работе был успешно разработан и исследован новый протокол очистки и активации поверхности прозрачных проводящих электродов (ITO и FTO) на основе аммиачно-перекисного раствора для применения в органической оптоэлектронике. Предложенный способ позволяет достичь значений поверхностной энергии до  $\sim 40$  мДж/м<sup>2</sup> после обработки АПР и до  $\sim 70$  мДж/м<sup>2</sup> после дополнительной активации озоном, что свидетельствует о формировании высокоактивной и гидрофильной поверхности. Рост энергии обусловлен, в первую очередь, увеличением полярной компоненты, что связано с эффективным удалением органических загрязнений и увеличением числа гидроксильных групп на поверхности плёнок.

Ключевым преимуществом предложенного метода является его щадящее воздействие. Показано, что обработка в АПР не приводит к значимым изменениям морфологии и её удельного поверхностного сопротивления. Это отличает его от агрессивных методов, таких как кислотное травление.

Предложенный метод является простым, воспроизводимым, не требует использования сложного оборудования и большого количества растворителей высокой чистоты и может быть легко интегрирован в стандартные технологические процессы. Обеспечивая высокое качество поверхности без её повреждения, АПР-очистка создаёт идеальные условия для нанесения последующих органических слоёв, что является критически важным для повышения эффективности и стабильности продукции при производстве OLED- и OPV-устройств.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Enhanced current efficiency in top-emitting organic light-emitting diodes using a novel Mg:Ag/Ag Cathode Structure / D. N. Chausov, A. D. Kurilov, N. S. Parashchuk, A. V. Nuriev, A. A. Morozov, A. D. Bozhko, V. S. Zhurkin, A. V. Kazak, S. A. Stakharniy // Applied Surface Science. 2025. Vol. 711. Article no. 163954. DOI: 10.1016/j.apsusc.2025.163954.
2. Fabrication of dye-sensitized solar cells based on push-pull asymmetrical substituted zinc and copper phthalocyanines and reduced graphene oxide nanosheets / F. Chindeka, P. Mashazi, J. Britton, D. O. Oluwole, S. Mapukata, T. Nyokong // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 2020. Vol. 399. Article no. 112612. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2020.112612.
3. ITO Electrode with a Tunable Work Function for Organic Photovoltaic Devices / Jinjin Yang, Hui Li, Jianming Yang, Bin Sun, Qinye Bao, Zheng Tang, Zaifei Ma // ACS Applied Electronic Materials. 2022. Vol. 4. Iss. 8. P. 4104–4112. DOI: 10.1021/acsaelm.2c00720.
4. Criteria for ITO (indium-tin-oxide) thin film as the bottom electrode of an organic light emitting diode / Y.-H. Tak, K.-B. Kim, H.-G. Park, K.-H. Lee, J.-R. Lee // Thin Solid Films. 2002. Vol. 411. Iss. 1. P. 12–16. DOI: 10.1016/S0040-6090(02)00165-7.

5. Organic photovoltaic devices based on polythiophene films electrodeposited on FTO substrates / R. Valaski, C. D. Canestraro, L. Micaroni, R. M. Q. Mello, L. S. Roman // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2007. Vol. 91. Iss. 8. P. 684–688. DOI: 10.1016/j.solmat.2006.12.005.
6. Transparent conducting thin films of fluoro doped tin oxide (FTO) deposited using inkjet printing technique / W. Z. Samad, M. M. Salleh, A. Shafiee, M. A. Yarmo // *IEEE International Conference on Semiconductor Electronics (ICSE2010)*. 2010. P. 52–55. DOI: 10.1109/SMELEC.2010.5549462.
7. Dependence of indium-tin-oxide work function on surface cleaning method as studied by ultraviolet and x-ray photoemission spectroscopies / K. Sugiyama, H. Ishii, Y. Ouchi, K. Seki // *Journal of Applied Physics*. 2000. Vol. 87. Iss. 1. P. 295–298. DOI: 10.1063/1.371859.
8. Effect of UV-ozone treatment on ITO and post-annealing on the performance of organic solar cells / T. Hu, F. Zhang, Zh. Xu, S. Zhao, X. Yue, G. Yuan // *Synthetic Metals*. 2009. Vol. 159. Iss. 7-8. P. 754–756. DOI: 10.1016/j.synthmet.2008.11.024.
9. Interplay of cleaning and de-doping in oxygen plasma treated high work function indium tin oxide (ITO) / I. Irfan, S. Graber, F. So, Y. Gao // *Organic Electronics*. 2012. Vol. 13. Iss. 10. P. 2028–2034. DOI: 10.1016/j.orgel.2012.05.036.
10. The relation between the electrical, chemical, and morphological properties of indium-tin oxide layers and double-layer light-emitting diode performance / P. Vacca, M. Petrosino, A. Guerra, R. Chierchia, C. Minarini, D. D. Sala, A. Rubino // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2007. Vol. 111. Iss. 46. P. 17404–17408. DOI: 10.1021/jp0744376.
11. Thermal and chemical treatment of ITO substrates for improvement of OLED performance / T. P. Nguyen, P. Le Rendu, N. N. Dinh, M. Fourmigué, C. Mézière // *Synthetic Metals*. 2003. Vol. 138. Iss. 1-2. P. 229–232. DOI: 10.1016/S0379-6779(02)01292-4.
12. Surface energy for electroluminescent polymers and indium-tin-oxide / Z. Zhong, S. Yin, C. Liu, Y. Zhong, W. Zhang, D. Shi, C. Wang, // *Applied Surface Science*. 2003. Vol. 207. Iss. 1–4. P. 183–189. DOI: 10.1016/S0169-4332(02)01328-4.

## REFERENCES

1. Chausov, D. N., Kurilov, A. D., Parashchuk, N. S., Nuriev, A. V., Morozov, A. A., Bozhko, A. D., Zhurkin, V. S., Kazak, A. V. & Stakharniy, S. A. (2025). Enhanced current efficiency in top-emitting organic light-emitting diodes using a novel Mg:Ag/Ag Cathode Structure. In: *Applied Surface Science*, 711, 163954. DOI: 10.1016/j.apsusc.2025.163954.
2. Chindeka, F., Mashazi, P., Britton, J., Oluwole, D. O., Mapukata, S. & Nyokong, T. (2020). Fabrication of dye-sensitized solar cells based on push-pull asymmetrical substituted zinc and copper phthalocyanines and reduced graphene oxide nanosheets. In: *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 399, 112612. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2020.112612.

3. Jinjin, Yang, Hui, Li, Jianming, Yang, Bin, Sun, Qinye, Bao, Zheng, Tang & Zaifei, Ma (2022). ITO Electrode with a Tunable Work Function for Organic Photovoltaic Devices. In: *ACS Applied Electronic Materials*, 4 (8), 4104–4112. DOI: 10.1021/acsaelm.2c00720.
4. Tak, Y.-H., Kim, K.-B., Park, H.-G., Lee, K.-H. & Lee, J.-R. (2002). Criteria for ITO (indium-tin-oxide) thin film as the bottom electrode of an organic light emitting diode. In: *Thin Solid Films*, 411 (1), 12–16. DOI: 10.1016/S0040-6090(02)00165-7.
5. Valaski, R., Canestraro, C. D., Micaroni, L., Mello, R. M. Q. & Roman, L. S. (2007). Organic photovoltaic devices based on polythiophene films electrodeposited on FTO substrates. In: *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 91 (8), 684–688. DOI: 10.1016/j.solmat.2006.12.005.
6. Samad, W. Z., Salleh, M. M., Shafiee, A. & Yarmo, M. A. (2010). Transparent conducting thin films of fluoro doped tin oxide (FTO) deposited using inkjet printing technique. In: *IEEE International Conference on Semiconductor Electronics (ICSE2010)*, 52–55. DOI: 10.1109/SMELEC.2010.5549462.
7. Sugiyama, K., Ishii, H., Ouchi, Y. & Seki, K. (2000). Dependence of indium-tin-oxide work function on surface cleaning method as studied by ultraviolet and x-ray photoemission spectroscopies. In: *Journal of Applied Physics*, 87 (1), 295–298. DOI: 10.1063/1.371859.
8. Hu, T., Zhang, F., Xu, Z., Zhao, S., Yue, X. & Yuan, G. (2009). Effect of UV-ozone treatment on ITO and post-annealing on the performance of organic solar cells. In: *Synthetic Metals*, 159 (7-8), 754–756. DOI: 10.1016/j.synthmet.2008.11.024.
9. Irfan, I., Graber, S., So, F. & Gao, Y. (2012). Interplay of cleaning and de-doping in oxygen plasma treated high work function indium tin oxide (ITO). In: *Organic Electronics*, 13 (10), 2028–2034. DOI: 10.1016/j.orgel.2012.05.036.
10. Vacca, P., Petrosino, M., Guerra, A., Chierchia, R., Minarini, C., Sala, D. D. & Rubino, A. (2007). The relation between the electrical, chemical, and morphological properties of indium-tin oxide layers and double-layer light-emitting diode performance. In: *The Journal of Physical Chemistry C*, 111 (46), 17404–17408. DOI: 10.1021/jp0744376.
11. Nguyen, T. P., Le Rendu, P., Dinh, N. N., Fourmigué, M. & Meziere, C. (2003). Thermal and chemical treatment of ITO substrates for improvement of OLED performance. In: *Synthetic Metals*, 138 (1-2), 229–232. DOI: 10.1016/S0379-6779(02)01292-4.
12. Zhong, Z., Yin, S., Liu, C., Zhong, Y., Zhang, W., Shi, D. & Wang, C. (2003). Surface energy for electroluminescent polymers and indium-tin-oxide. In: *Applied Surface Science*, 207 (1-4), 183–189. DOI: 10.1016/S0169-4332(02)01328-4.

---

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Кононенко Никита Евгеньевич (г. Москва) – техник учебно-научной лаборатории теоретической и прикладной нанотехнологии Государственного университета просвещения;

<https://orcid.org/0009-0005-4860-1707>; e-mail: kononenkonick2708@gmail.com

*Симушкина Софья Владимировна* (г. Москва) – студент физико-математического факультета Государственного университета просвещения;  
<https://orcid.org/0009-0002-1529-6310>; e-mail: [simushkinasofa@gmail.com](mailto:simushkinasofa@gmail.com)

*Чекулаев Игорь Сергеевич* (г. Москва) – младший научный сотрудник учебно-научной лаборатории теоретической и прикладной нанотехнологии Государственного университета просвещения;  
<https://orcid.org/0000-0002-6636-5876>; e-mail: [chekulaev.i.s@yandex.ru](mailto:chekulaev.i.s@yandex.ru)

*Курилов Александр Дмитриевич* (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, заведующий учебно-научной лабораторией теоретической и прикладной нанотехнологии Государственного университета просвещения;  
<https://orcid.org/0000-0001-8915-2411>; e-mail: [ad.kurilov@guppros.ru](mailto:ad.kurilov@guppros.ru)

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Nikita E. Kononenko* (Moscow) – Technician, Laboratory of Theoretical and Applied Nanotechnology, Federal State University of Education;  
<https://orcid.org/0009-0005-4860-1707>; e-mail: [kononenkonick2708@gmail.com](mailto:kononenkonick2708@gmail.com)

*Sofya V. Simushkina* (Moscow) – Student, Faculty of Physics and Mathematics, Federal State University of Education;  
<https://orcid.org/0009-0002-1529-6310>; e-mail: [simushkinasofa@gmail.com](mailto:simushkinasofa@gmail.com)

*Igor S. Chekulaev* (Moscow) – Junior Researcher, Laboratory of Theoretical and Applied Nanotechnology, Federal State University of Education;  
<https://orcid.org/0000-0002-6636-5876>; e-mail: [chekulaev.i.s@yandex.ru](mailto:chekulaev.i.s@yandex.ru)

*Aleksandr D. Kurilov* (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Head of Laboratory, Laboratory of Theoretical and Applied Nanotechnology, Federal State University of Education;  
<https://orcid.org/0000-0001-8915-2411>; e-mail: [ad.kurilov@guppros.ru](mailto:ad.kurilov@guppros.ru)

**Научная статья****УДК 533.5+533.6****DOI 10.18384/2949-5067-2025-4-100****МЕТОД ЛОКАЛЬНОГО ПОДОБИЯ ДЛЯ РАСЧЁТА АЭРОДИНАМИКИ ПРИ МАЛЫХ СВЕРХЗВУКОВЫХ СКОРОСТЯХ ПОЛЁТА*****Полевщиков Д. П.\*; Кашковский А. В.****Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, Российская Федерация**\*Корреспондирующий автор, e-mail: polevshchikov@itam.nsc.ru**Поступила в редакцию 09.10.2025**После доработки 17.10.2025**Принята к публикации 21.10.2025***Аннотация**

**Цель** – верификация метода локального подобия для расчёта аэродинамики летательных аппаратов для малых сверхзвуковых скоростей.

**Процедура и методы.** Основным критерием для построения данной методики является минимальное время расчёта. Методика основывается на гипотезе локальности: аэродинамические характеристики каждого элемента поверхности рассчитываются независимо друг от друга. Предлагаемая методика представляет собой совокупность известных методов в рамках сверхзвукового обтекания тонкой пластины и гибкого механизма их применения с учётом кривизны поверхности летательного аппарата.

**Результаты.** Проведена верификация предлагаемой методики на конусе, веретенообразном теле и прямом крыле с тонким профилем в сравнении с существующими методиками расчёта аэродинамики и численным моделированием. Продемонстрировано хорошее совпадение значений аэродинамических коэффициентов с результатами численного расчёта.

**Теоретическая и/или практическая значимость** заключается в использовании рассматриваемой методики для предварительной оценки аэродинамики летательного аппарата на малых сверхзвуковых скоростях полёта с последующим их уточнением с помощью более точных методов.

**Ключевые слова:** аэродинамика, аэродинамические характеристики, сверхзвуковое обтекание, тонкая пластина, локальный метод

**Благодарности:** Работа была выполнена с использованием ресурсов ЦКП Сибирский Суперкомпьютерный Центр ИВМиМГ СО РАН и ЦКП «Механика». Работа выполнена в рамках государственного задания ИТПМ СО РАН (№ гос. регистрации: 124021400040-4).

**Для цитирования:**

Полевщиков Д. П., Кашковский А. В. Метод локального подобия для расчёта аэродинамики при малых сверхзвуковых скоростях полёта // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 4. С. 17–41. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-100>.

**Original research article****LOCAL SIMILARITY METHOD FOR AERODYNAMICS CALCULATION AT LOW SUPERSONIC FLIGHT SPEED****D. Polevshchikov\*, A. Kashkovsky***Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics  
of the Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russian Federation**\*Corresponding author, e-mail: polevshchikov@itam.nsc.ru**Received by the editorial office 09.10.2025**Revised by the author 17.10.2025**Accepted for publication 21.10.2025***Abstract**

**Aim.** Verification of local similarity method for calculating the aerodynamics of aircraft at low supersonic speeds.

**Methodology.** The primary criterion for developing this method is minimal computation time. The method is based on the hypothesis of locality, i.e. aerodynamic characteristics of each surface element are calculated independently. The proposed technique for aerodynamics calculation is a combination of well-known methods widely-used in supersonic flow around a thin plate and a flexible mechanism for their application taking into account the curvature of the aircraft surface.

**Results.** The technique proposed has been verified on s cone, a slender body of revolution and a thin straight wing. The verification has been carried by comparing with numerical simulation results and existing techniques of aerodynamics calculation. Good agreement between the aerodynamic coefficient values and the numerical calculation results was demonstrated.

**Research implications.** The technique considered is supposed to be used to make preliminary assessment of the aerodynamics of an aircraft at low supersonic flight speeds, followed by their refinement using more accurate methods.

**Keywords:** aerodynamics, aerodynamic characteristics, supersonic flow, thin plate, local method

**Acknowledgments.** The numerical experiments were performed with the use of resources of the Equipment Sharing Center "Mekhanika" (Mechanics) based at ITAM SB RAS and of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences Siberian Supercomputer Center. This study was performed within the framework of the State Contract of the Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (ITAM SB RAS) (№124021400040-4).

**For citation:**

Polevshchikov, D. P. & Kashkovsky, A. V. (2025). Local similarity method for aerodynamics calculation at low supersonic flight speed. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 4, pp. 17–41. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-100>.

**Введение**

Одной из концепций космического туризма является суборбитальный полёт на летательном аппарате. В соответствии с этой концепцией, аппарат поднимается на высоту 10-20 км, переводится в почти вертикальный набор высоты и с помощью ракетного двигателя разгоняется до скорости, достаточной

для достижения по инерции высоты выше 100 км (условная высота нижней границы космического пространства). При возвращении из космоса аппарат переходит из баллистического в горизонтальный полёт с последующей посадкой.

При спуске летательный аппарат под действием силы тяжести разгоняется в разреженной атмосфере до скорости порядка километра в секунду. Когда плотность атмосферы возрастает до возможности аэродинамического маневрирования (высоты 40–60 км) число Маха полёта достигает 3–3.5. И именно на такой скорости необходимо перевести самолёт в горизонтальный полёт. Это самый сложный этап полёта, потому что резкое маневрирование приводит к значительным поперечным перегрузкам, что является непригодным при транспортировке пассажиров. Затягивание же манёвра из-за снижения с большой скоростью приводит к резкому увеличению плотности и большим продольным перегрузкам. Задача определения оптимальной траектории с наименьшими перегрузками связана с подбором аэродинамической компоновки самолёта, обеспечивающей движение вдоль требуемой траектории. Поскольку обычные сверхзвуковые самолёты и космические спускаемые аппараты не проектируются для манёвров на сверхзвуковых скоростях, прототипы фактически отсутствуют. Предполагается, что для решения данной задачи придётся рассматривать большое количество компоновок, включая нестандартные (например, туристические аппараты компании VirginGalactic серии SpaceShipOne и SpaceShipTwo имеют отклоняемый вместе с частью фюзеляжа стабилизатор).

Поиск оптимальной аэродинамической компоновки сопровождается большим количеством (вплоть до сотни) аэродинамических расчётов для заданного диапазона чисел Маха, углов атаки (SpaceShipOne и SpaceShipTwo входят в атмосферу под углом атаки близким к  $90^\circ$ ) и скольжения. Представляется целесообразным использование методов, позволяющих, пусть и с большей (в сравнении с классическими методами) погрешностью, но довольно быстро (за секунды) получать аэродинамические характеристики (АДХ). Это позволило бы выявить наиболее перспективные варианты компоновок, АДХ которых уже можно было бы уточнять с помощью классических вычислительных методов сплошной среды. Оценивается, что погрешность таких методов в пределах 20% является приемлемой для выбора перспективных конфигураций.

Казалось бы, использование мощных современных процессоров и параллельных вычислений нивелирует фактор скорости вычислений. Но вычисления методами сплошной среды требуют создания вычислительной сетки. Для этого, как правило, требуется вмешательство оператора и специальным образом подготовленная поверхностная модель (без разрывов, пересечений). Вследствие часто меняющейся аэродинамической конфигурации затраты времени на подготовку сетки могут оказаться гораздо большими, чем временные затраты на вычисления. Кроме того, для построения модели и сетки

требуется специальное, совместимое программное обеспечение, которое, как правило, коммерческое. Методы, основанные на локальном подходе, не требуют создания вычислительной сетки, а иногда допускают щели или пересечение элементов геометрической модели. Это позволяет использовать более доступные и простые средства создания поверхностной модели. Всё это позволяет существенно упростить и ускорить вычисления.

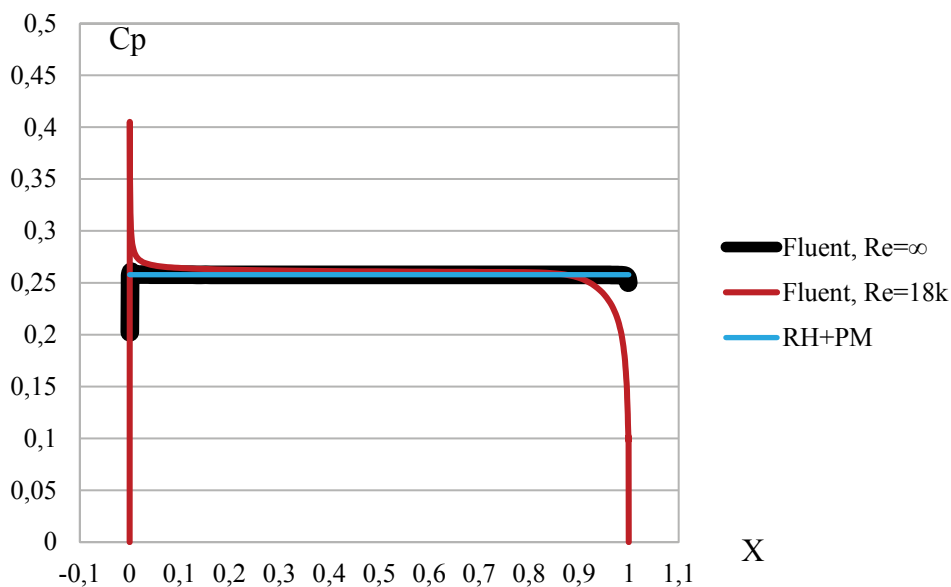
Начиная с 60-х годов прошлого века для проектирования спускаемых аппаратов стали использовать методы [1–6], основанные на гипотезе локальности: влияние среды на элемент поверхности тела зависит только от отражательных свойств элемента поверхности, скорости среды относительно тела и не зависит от присутствия других участков поверхности [7]. Постепенно их заменяют более точные методы [8], но благодаря своей простоте они используются до сих пор [9–11]. Однако данные методики разрабатывались для расчёта аэродинамики спускаемых аппаратов при очень высоких числах Маха, причём в некоторых из них используется упрощающее предположение  $M \rightarrow \infty$ . Некоторые из методов [12] применимы только в случае присоединённой ударной волны (метод касательных клиньев и конусов, метод скачков-расширений); другие лучше работают с тонкими заострёнными телами (теория Ньютона) или телами затупленной формы (модифицированная теория Ньютона). Использование полуэмпирических формул (например, [4]) также рассчитано на большие числа Маха.

Использование предположения  $M \rightarrow \infty$  для умеренно сверхзвуковых ( $M < 3$ ) течений некорректно. В данной работе предлагается методика расчёта АДХ для летательных аппаратов произвольной формы при малых сверхзвуковых скоростях полёта на основе гипотезы локальности и широко известных газодинамических соотношений. Поскольку применимость гипотезы локальности для сверхзвуковых течений вызывает некоторые сомнения, приведены оценка точности вычислений в сравнении с экспериментальными данным и расчётами CFD.

### **Методика расчёта аэродинамических характеристик**

Методика расчёта сверхзвуковой аэродинамики EARL (Engineering AeRo dynamics caLculation) построена на предположении, что давление на элемент поверхности тела зависит только от ориентации этого элемента относительно набегающего потока и не зависит от формы остальной части тела [12]. EARL основана на теории сверхзвукового обтекания тонкой пластины. Расчётная модель аппарата задаётся триангулированной поверхностью, давление на элементарную площадку которой вычисляется согласно её ориентации относительно набегающего на аппарат потока. На наветренной стороне площадки используются соотношения Рэнкина-Гюгонио на косой ударной волне для сжимающегося сверхзвукового потока. На подветренной стороне рассматривается течение Прандтля-Майера для расширяющегося сверхзвукового потока [13; 14].

В качестве подтверждения возможности применения подобной методики расчёта на рис. 1 приведено изменение коэффициента давления  $C_p$  вдоль пластины, полученное с помощью пакета программ FLUENT для различных чисел Рейнольдса. Согласно графику, при  $Re \rightarrow \infty$  давление на всей пластине постоянно, при  $Re=18\ 000$  наблюдается увеличение давления на передней кромке ( $X \approx 0$ ) и уменьшение на задней ( $X \approx 1$ ). За исключением этих участков давление на поверхности пластины также остаётся постоянным. На этот же график нанесены значения  $C_p$ , полученные с помощью соотношений Рэнкина-Гюгио и течения Прандтля-Майера (обозначение “RH+PM”).



**Рис. 1 / Fig. 1.** Коэффициент давления вдоль пластины. Угол атаки  $\alpha=10^\circ$ ,  $M=3$  // Pressure coefficient along the plate. Angle of attack  $\alpha=10^\circ$ ,  $M=3$

*Источник:* подготовлено авторами

Очевидно, что при сравнении результатов пакета программ FLUENT с методом, основанным на соотношениях Рэнкина-Гюгио и течении Прандтля-Майера, при малых числах Рейнольдса коэффициент давления на концах пластины отличается, однако на рассматриваемых режимах полёта спускаемых аппаратов реализуются течения, где  $Re \rightarrow \infty$ . Следовательно, коэффициент давления вдоль пластины допустимо считать постоянным.

Рассматриваемый метод расчёта соответствует задаче невязкого обтекания пластины, описываемой уравнениями Эйлера. Возможность использования модели Эйлера также подтверждается в работе [15].

Для расчёта давления определяется принадлежность каждого элемента поверхности к наветренной или подветренной стороне летательного аппарата.

Для этого требуется вычислить угол между векторами нормали  $\vec{n}$  площадки поверхности и скорости набегающего потока  $\vec{V}_\infty$ , что равнозначно вычислению скалярного произведения рассматриваемых векторов  $\vec{n} \cdot \vec{V}_\infty$ . Считается, что элемент поверхности располагается на наветренной стороне поверхности, если  $\vec{n} \cdot \vec{V}_\infty < 0$ , в противном случае – на подветренной стороне.

#### Обтекание наветренной стороны

При обтекании элемента поверхности с наветренной стороны решается задача обтекания клина сверхзвуковым потоком на основании соотношения Рэнкина-Гюгонию на косой ударной волне. Рассматриваются два вида течений: с отошедшей ( $\beta > \beta_{max}$ ) и присоединённой ( $\beta < \beta_{max}$ ) ударной волной; здесь  $\beta$  – угол косой ударной волны (угол между вектором скорости набегающего потока и фронтом ударной волны). Максимальный угол косой ударной волны  $\beta_{max}$  может быть получен из соотношения [14, с. 140]:

$$\sin^2 \beta_{max} = \frac{1}{\gamma M_\infty^2} \left[ \frac{\gamma + 1}{4} M_\infty^2 - 1 + \sqrt{(\gamma + 1) \left( 1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_\infty^2 + \frac{\gamma + 1}{16} M_\infty^4 \right)} \right]$$

где  $M_\infty$  – число Маха набегающего невозмущённого потока,  $\gamma$  – показатель адиабаты. На рис. 2 представлена схема обтекания клина сверхзвуковым потоком.

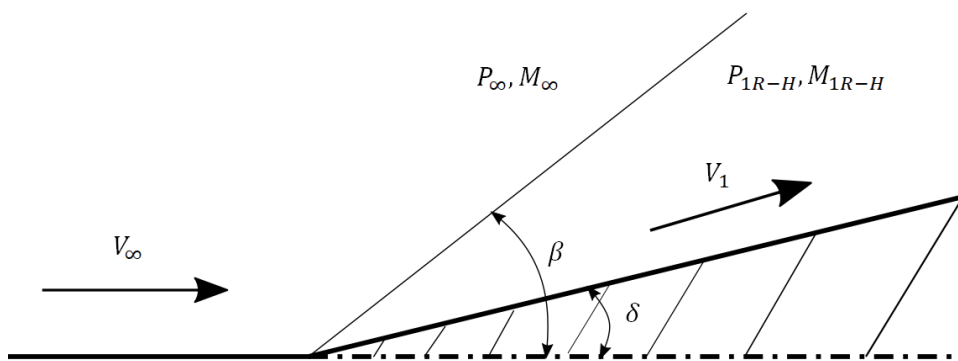


Рис. 2 / Fig. 2. Схема обтекания клина сверхзвуковым потоком / Scheme of supersonic flow around a wedge

Источник: подготовлено авторами

Так как за ударной волной поток движется вдоль элемента поверхности, то угол атаки площадки равен углу поворота  $\delta$  потока. Угол  $\beta$  определяется методом бисекции согласно следующей формуле:

$$tg\delta = \frac{M_\infty^2 \sin^2 \beta - 1}{\left[ M_\infty^2 \left( \frac{\gamma+1}{2} - \sin^2 \beta \right) + 1 \right] tg\beta} \quad (1)$$

В случае, когда  $\beta < \beta_{max}$ , угол косо́й ударной волны определяется методом половинного деления согласно (1) на интервале  $\beta_0 < \beta < \beta_{max}$ , где  $\beta_0 = \arcsin\left(\frac{1}{M_\infty}\right)$  – угол Маха.

Давление за косо́й ударной волной находится из соотношения:

$$\frac{P_{1R-H}}{P_\infty} = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \left( \frac{2\gamma}{\gamma - 1} M_\infty^2 \sin^2 \beta - 1 \right)$$

где  $P_{1R-H}$  – давление за косо́й ударной волной,  $P_\infty$  – давление невозмущённого потока.

Число Маха за косо́й ударной волной равно:

$$M_{1R-H}^2 = \frac{M_\infty^2 + \frac{2}{\gamma-1}}{\frac{2\gamma}{\gamma-1} M_\infty^2 \sin^2 \beta - 1} + \frac{M_\infty^2 \cos^2 \beta - 1}{\frac{\gamma-1}{2} M_\infty^2 \sin^2 \beta + 1}$$

Если треугольная площадка расположена поперёк набегающего потока ( $\beta = \frac{\pi}{2}$ ), то в потоке устанавливается прямая ударная. Давление за отошедшей ударной волной, соответствующее углу  $\beta$ , лежащему на интервале  $\beta_{max} < \beta < \frac{\pi}{2}$ , рассчитывается с помощью линейной интерполяции между значением давления при  $\beta_{max}$  и давлением торможения потока, полученного из изоэнтропических формул.

Коэффициент давления на площадку

$$C_p = \frac{P - P_\infty}{\frac{\rho V_\infty^2}{2}} = \frac{2}{\gamma M_\infty^2} \left( \frac{P}{P_\infty} - 1 \right) \quad (2)$$

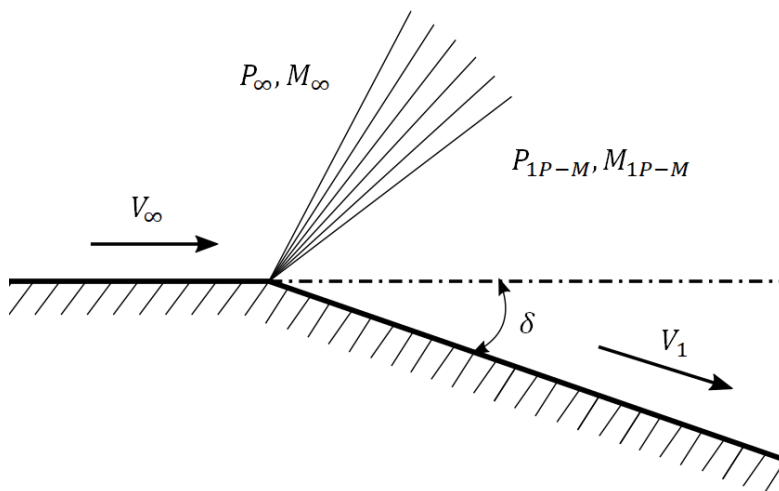
где  $\rho$  – плотность воздуха,  $P$  – давление потока за ударной волной, оказываемое на элемент поверхности.

#### Соотношения Рэнкина-Гюгонио на конической ударной волне

Очевидно, что при достаточно большой кривизне поверхности давление за ударной волной будет соответствовать давлению за конической ударной волной, и будет меньше чем в случае присоединённой ударной волны на клине. Для учёта конусности поверхности при расчёте давления на элементарную площадку наветренной стороны летательного аппарата используется аппроксимационные формулы [16].

### Обтекание подветренной стороны

На подветренной стороне решается задача обтекания тупого угла, течение Прандтля-Майера. На рис. 3 приведена схема такого обтекания.



**Рис. 3 / Fig. 3.** Схема обтекания тупого угла сверхзвуковым потоком / Scheme of supersonic flow around an obtuse angle

Источник: подготовлено авторами

Максимальный угол поворота потока соответствует углу поворота потока при истечении в вакуум. Число Маха отклонённого потока находится методом половинного деления, используя выражение [17, с. 249]:

$$\delta = \sqrt{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}} \arctg \left( \sqrt{\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} (M_{1P-M}^2 - 1)} \right) - \arctg \left( \sqrt{M_{1P-M}^2 - 1} \right)$$

Давление расширяющегося потока на площадку вычисляется по формуле:

$$\frac{P_{1P-M}}{P_\infty} = \left( \frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_\infty^2}{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_{1P-M}^2} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}$$

где  $P_{1P-M}$ —давление, а  $M_{1P-M}$ —число Маха в расширяющемся потоке.

### Учёт кривизны поверхности летательного аппарата

Поскольку теория Прандтля-Майера описывает только плоское течение, её использование для расчёта конических течений приводит к высокой погрешности итоговых аэродинамических характеристик. Однако, если кривизна поверхности поперёк потока невелика, например, при обтекании крыла с переменной толщиной вдоль размаха, то течение можно считать

плоскопараллельным. Вследствие этого, предлагается проводить анализ каждого элемента поверхности, по результатам которого будет использоваться один из двух подходов к расчёту коэффициента давления.

Первый подход реализуется для случая, если рассматриваемая площадка является элементом крыла. Тогда коэффициент давления на наветренной стороне вычисляется с помощью соотношений Рэнкина-Гюгонио на клине, а на подветренной стороне – согласно теории течения Прандтля-Майера.

Второй подход предлагается использовать в случаях, когда рассматриваемая площадка является элементом фюзеляжа. В этом случае на наветренной стороне коэффициент давления рассчитывается согласно аппроксимационным формулам [16], а на подветренной стороне берётся равным нулю.

В дальнейшем, говоря о фюзеляже, будем иметь в виду тела вытянутой формы с компактным поперечным сечением (конус, цилиндр и прочие объекты более сложной формы и их комбинации). Аналогично с крылом – будем рассматривать тела плоскообразной формы (крыло, оперение и др.).

Для проведения анализа принадлежности площадки (треугольника) к крылу или к фюзеляжу введём понятие «нормаль в вершине» – среднее арифметическое нормалей всех треугольников, которым рассматриваемая вершина принадлежит.

$$\vec{n}_{vk} = \frac{1}{N_k} \sum_i^{N_k} \vec{n}_i,$$

где  $N_k$  – число треугольников при  $k$ -вершине. Далее вычисляется вектор поперечного направления, являющегося результатом векторного умножения векторов набегающего потока и нормали к поверхности рассматриваемой площадки.

$$\vec{\tau}_k = \vec{V}_\infty \times \vec{n}_k, \quad k = 1, \dots, N_{pan},$$

где  $N_{pan}$  – общее число площадок (треугольников).

Если модуль проекции всех  $N$  «нормалей в вершине»  $k$ -площадки на вектор поперечного направления мала

$$|\vec{n}_{vi} \cdot \vec{\tau}_k| \ll 1, \quad i = 1, \dots, N, \quad k = 1, \dots, N_{pan}$$

то данный элемент поверхности является частью крыла, в обратном случае – частью фюзеляжа.

#### Расчёт коэффициентов аэродинамических сил и момента

Расчёт аэродинамических сил и продольного момента производится путём интегрирования значений для каждой элементарной площадки по поверхности аппарата. Определим силу давления  $\vec{F}_p$  на элементарную площадку с нормалью  $\vec{n}$ . Для системы координат, связанной с телом (базисные векторы  $\vec{x}$  и  $\vec{y}$ ), проекции этой силы на оси  $OX$  и  $OY$  равняются

$$F_{Px} = (-\vec{n} * \vec{x}) C_p \frac{\rho V_\infty^2}{2} S_{pan} \quad (3)$$

$$F_{Py} = (-\vec{n} * \vec{y}) C_p \frac{\rho V_\infty^2}{2} S_{pan} \quad (4)$$

где  $S_p$  – площадь отдельного треугольника,  $\rho$  – плотность набегающего потока.

Продольный момент  $M_z$  равняется

$$M_z = F_{Px}(Y - Y_g) + F_{Py}(X - X_g) \quad (5)$$

где  $X$ ,  $Y$  и  $X_g$ ,  $Y_g$  – координаты центра треугольника и центра тяжести тела соответственно.

В то же время аэродинамические силы и моменты записываются следующим образом

$$F_{Px} = C_x \frac{\rho V_\infty^2}{2} S_{ref}, \quad (6)$$

$$F_{Py} = C_y \frac{\rho V_\infty^2}{2} S_{ref}, \quad (7)$$

$$M_z = m_z \frac{\rho V_\infty^2}{2} S_{ref} L_{ref} \quad (8)$$

где  $S_{ref}$  и  $L_{ref}$  – характерная площадь и размер тела соответственно.

Тогда, согласно (3)–(8), коэффициенты  $C_x$ ,  $C_y$ ,  $m_z$  можно записать в следующем виде:

$$C_x = \frac{1}{S_{ref}} \sum_i^{N_{pan}} (-\vec{n}_i * \vec{x}) C_{P_i} S_{pan_i},$$

$$C_y = \frac{1}{S_{ref}} \sum_i^{N_{pan}} (-\vec{n}_i * \vec{y}) C_{P_i} S_{pan_i}.$$

$$m_z = \frac{1}{S_{ref} L_{ref}} \sum_i^{N_{pan}} C_{P_i} S_{pan_i} [(-\vec{n}_i * \vec{x})(Y_i - Y_g) + (-\vec{n}_i * \vec{y})(X_i - X_g)]$$

Вышеописанный алгоритм методики EARL по расчёту АДХ летательных аппаратов был реализован в программном коде на языке программирования C++.

### Оценка погрешности методики EARL

Для оценки методики EARL было проведено сравнение с экспериментальными данными обтекания конуса с углом полураствора 15 град [18]. Число Маха набегающего потока составляет  $M_\infty = 3.47$ . Диапазон углов атаки составляет 0 до 40 град. Характерная площадь, используемая в рамках методики EARL, равнялась  $S_{ref} = 1\text{ м}^2$ . Результаты расчёта АДХ представлены на графике (рис. 4).

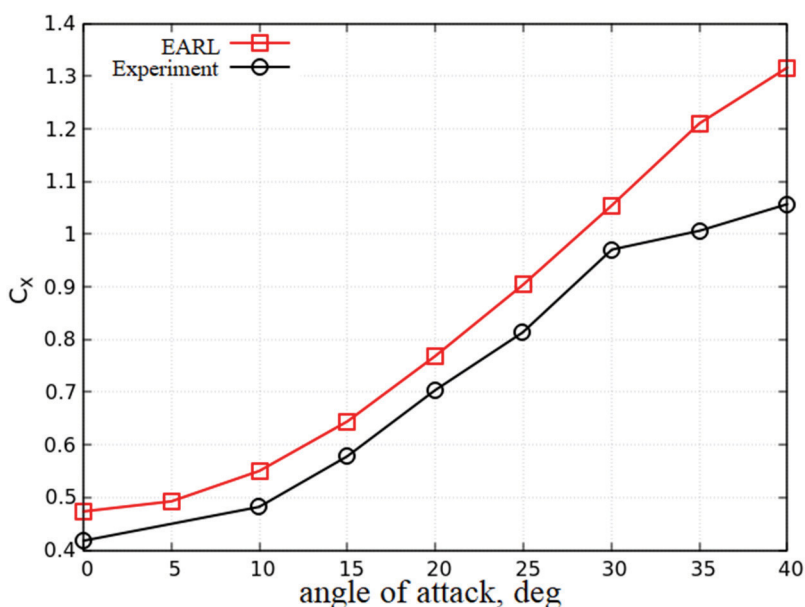
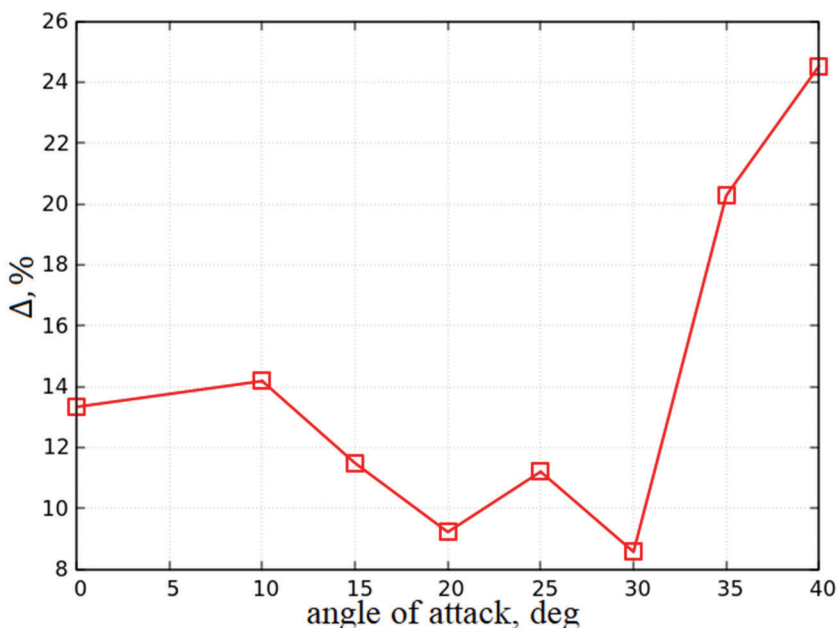


Рис. 4 / Fig. 4. Зависимость коэффициента продольной силы от угла атаки /  
Dependence of the longitudinal force coefficient on the angle of attack

Источник: подготовлено авторами

Значения коэффициента продольной силы, полученные с помощью методики EARL, варьируются от 0.473 до 1.316. Погрешность расчёта относительно эксперимента (9) (индекс exp – экспериментальные данные) не превышает 15% для диапазона углов 0–30 град и не более 25% для 35–40 град. (см. рис. 5).

$$\Delta = \frac{|C_{xEARL} - C_{xexp}|}{C_{xexp}} * 100\%, \quad (9)$$



**Рис. 5 / Fig. 5.** Погрешность расчёта коэффициента продольной силы относительно эксперимента / Error in calculating the longitudinal force coefficient relative to the experiment

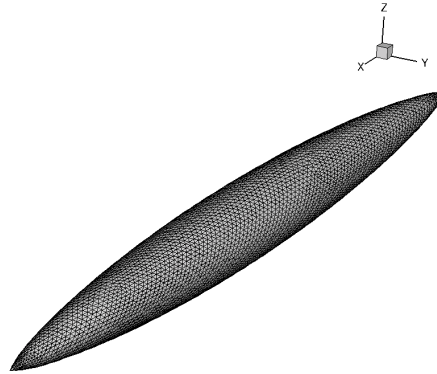
*Источник:* подготовлено авторами

В рамках дальнейшей верификации результаты методики EARL сравнивались с другими моделями расчёта давления набегающего потока на элементарную площадку поверхности. Для сравнения использовались аппроксимационные формулы В. С. Николаева [19] и модифицированный метод местных клиньев Д. М. Фофонова [20]. Данные модели расчёта давления были реализованы в рамках разработанного программного для методики EARL, что является возможным благодаря гибкой архитектуре, созданной в соответствии с парадигмой объектно-ориентированного программирования.

Результаты расчёта АДХ, полученных с помощью трёх моделей (EARL, моделей Николаева В. С и Фофонова Д. М), сравнивались с результатами численного моделирования, выполненными с помощью программного комплекса SUNSHyNE [21] для численного моделирования сжимаемых высокоскоростных течений.

#### Фюзеляжеобразное тело

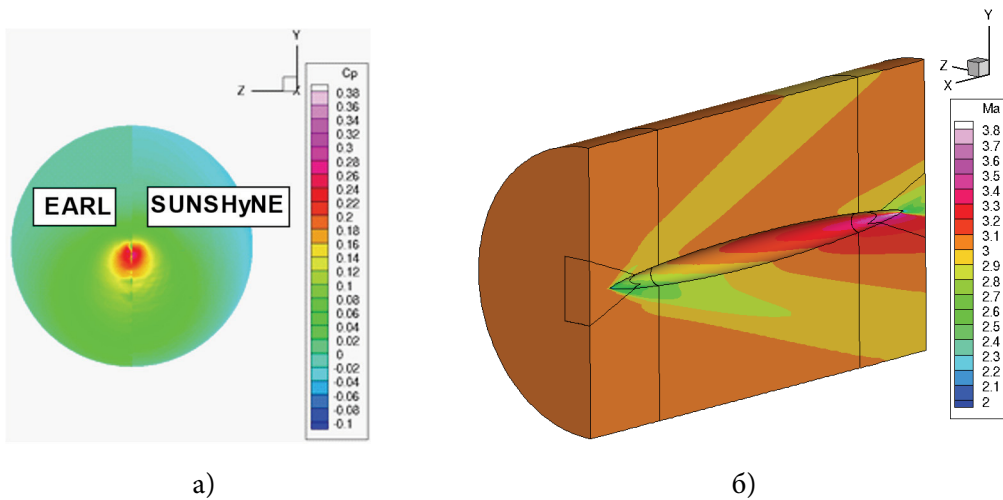
В качестве фюзеляжеобразного тела было выбрано тело вращения Сирс-Хаака (рис. 6) [22, р. 21]. Координаты точек представлены в приложении А в табл. 1, где  $Y$  – диаметр участка при заданном  $X$ . Характерная площадь равна площади миделя  $S_{ref} = \pi R^2$ ,  $R = 0,5$  м.



**Рис. 6 / Fig. 6.** Триангулированная поверхность расчётного тела Сирс-Хаака /  
Triangulated surface of the Sears-Haack calculation body.

*Источник: подготовлено авторами*

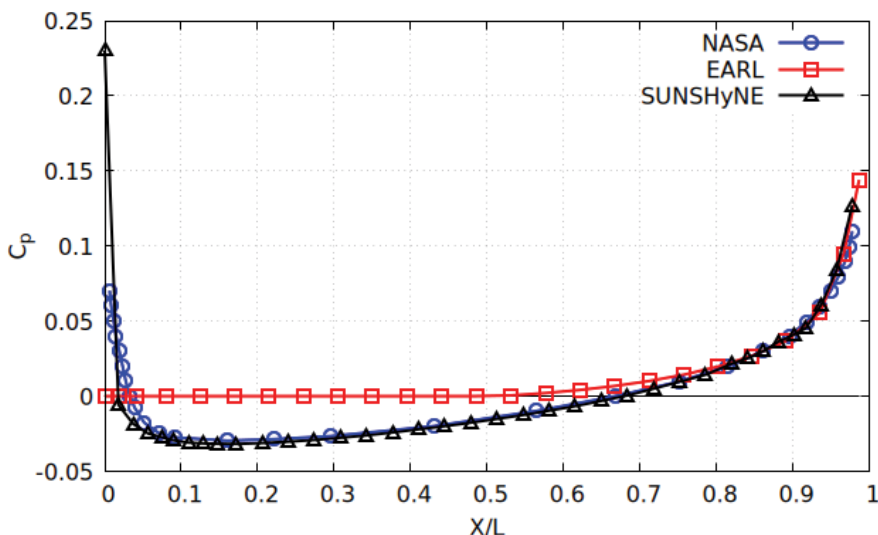
На рис. 7 представлен расчёт течения вблизи тела Сирс-Хаака комплексом SUNSHyNE для угла атаки 5 град, числа Маха набегающего потока  $M_\infty = 3$ . На рис. 7а можно заметить более выраженную область донного давления по краям вида спереди для случая численного моделирования, но в остальном наблюдается качественное совпадение распределения давления по передней поверхности тела.



**Рис. 7 / Fig. 7.** Моделирование течения вблизи тела Сирс-Хаака: а) распределение коэффициента давления по поверхности фюзеляжа (вид спереди, сравнение с EARL-расчётом); б) поле течения числа Маха вокруг фюзеляжа / Simulation of the flow near the Sears-Haack body: а) distribution of the pressure coefficient over the fuselage surface (front view, comparison with EARL calculation); б) Mach number flow field around the fuselage

*Источник: подготовлено авторами*

На рис. 8 сравнивается распределение коэффициента давления вдоль тела Сирс-Хаака, полученное с использованием предлагаемой методики (EARL), с результатами численного моделирования (SUNSHyNE) и экспериментальными данными (NASA) [22]. Угол атаки составляет 0 град. Число Маха набегающего потока равно  $M_\infty = 3$ . Нос исследуемого тела располагается в координате  $X/L = 1$ .



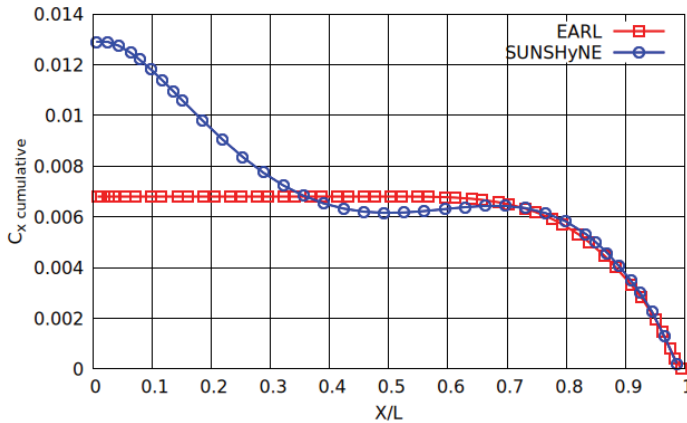
**Рис. 8 / Fig. 8.** Распределение коэффициента давления вдоль тела Сирс-Хаака / Distribution of pressure coefficient along the Sears-Haack body

*Источник:* подготовлено авторами

Из рис. 8 видно, что кривые “SUNSHyNE” и “NASA” хорошо совпадают друг с другом. Коэффициент давления для участка графика кривой “EARL”  $x \in [0; 0.6]$  равняется нулю, т. к., согласно описанному ранее алгоритму расчёта давления, значение коэффициента на подветренных участках для конических тел равняется нулю. В противном случае, учёт вклада давления на подветренной стороне приводит к завышенным по модулю значениям коэффициента давления в сравнении с кривыми “SUNSHyNE” и “NASA”.

На рис. 9 представлено изменение интеграла  $\int_0^L C_{xi} dx$  при движении от носа к хвосту фюзеляжа ( $X/L = 1$  соответствует крайней носовой точке фюзеляжа), где  $C_{xi}$  – значение коэффициента продольной силы в точке  $x_i$ , полученное методом EARL и комплексом SUNSHyNE.

Значения интегрального  $C_x$  для EARL и SUNSHyNE на участке  $x/L \in [0.7; 1.]$  практически совпадают. Далее по направлению к хвосту  $C_{x_{EARL}}$  остаётся постоянным, в то время как в SUNSHyNE за счёт донного давления  $C_x$  возрастает. Отсутствие учёта донного давления в EARL приводит к искажению значений давления в случае фюзеляжа. Однако при увеличении угла атаки вклад



**Рис. 9 / Fig. 9.** Изменение интегральной характеристики  $C_x$  при движении от носа к хвосту фюзеляжа. Угол атаки 0 град. Число Маха 3 / Change in the integral characteristic  $C_x$  when moving from the nose to the tail of the fuselage. Angle of attack is 0 degrees. Mach number is 3.

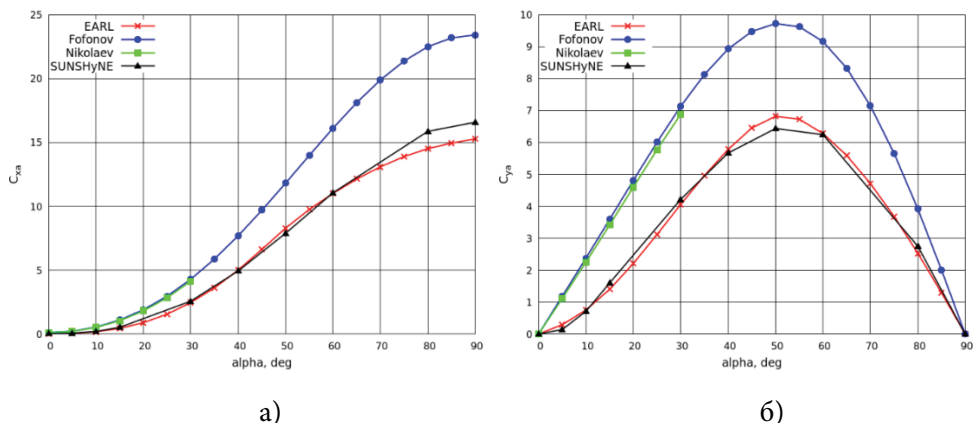
Источник: подготовлено авторами

в лобовое сопротивление от наветренной части тела Сирс-Хаака растёт (рис. 10а), а величина донного давления остаётся практически постоянной. Таким образом, на больших углах атаки вклад в погрешность от отсутствия учёта донного давления невелик.

Из рис. 10 прекрасно видно, что расчёты коэффициентов лобового сопротивления и подъёмной силы для различных углов атаки лучше совпадают с результатами численного моделирования, чем другие модели. Данный факт, предположительно, связан с тем, что модели Николаева В. С. и Фофонова Д. М. ориентированы на значительно большие сверхзвуковые скорости полёта. Также при расчёте давления в приводимых для сравнения моделях отсутствует учёт конусности поверхности, что приводит к завышению значений за счёт донного давления. Необходимо отметить, что в модели Фофонова Д. М. возможна калибровка моделируемого давления на элемент площадки поверхности за счёт изменения коэффициентов  $k_1$  и  $k_2$  (см. [20]), однако это требует проведения дополнительных расчётов для получения оптимальных значений давления. В то время как рассматриваемая методика EARL моделирует давление на поверхности аппарата с удовлетворительной точностью из-за лежащего в её основе предположения о малых сверхзвуковых скоростях полёта.

Оценка погрешности в вычислениях коэффициента продольного момента  $m_z$  выполняется сравнением положения центра давления относительно оси X для фюзеляжа (рис. 12), вычисляемого по формуле

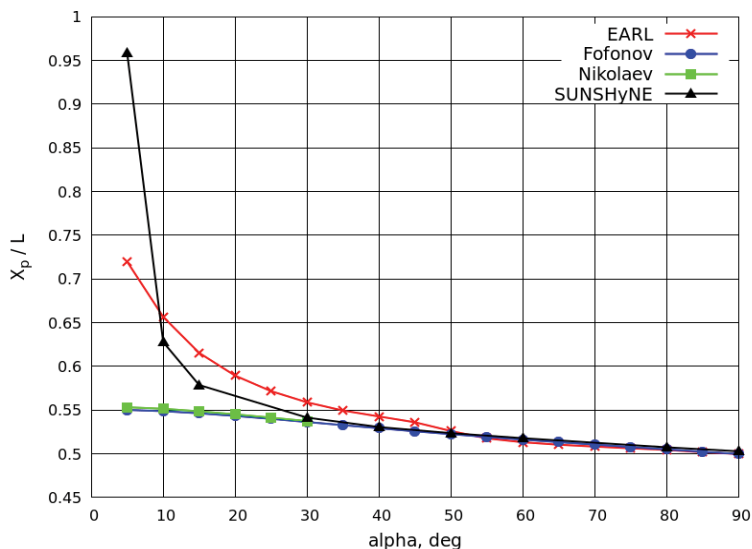
$$X_p = L_{ref} * \frac{m_z}{C_y} + X_g \quad (10)$$



**Рис. 10 / Fig. 10.** Зависимость коэффициентов а) лобового сопротивления и б) подъёмной силы от угла атаки фюзеляжа. Число Маха 3 / The dependence of the coefficients of a) drag and б) lift on the angle of attack of the fuselage. Mach number 3

*Источник: подготовлено авторами*

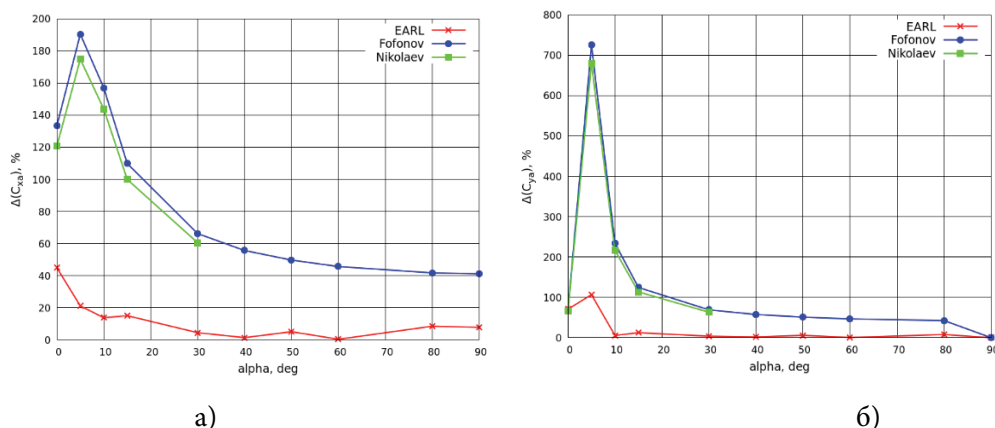
На рис. 11 наблюдается нереалистичное изменение положения центра давления при малых углах атаки в случае численного моделирования. Данный эффект может быть связан с особенностями численного моделирования или неудачным выбором объекта исследования в качестве фюзеляжа. Необходимо провести дополнительные численные эксперименты.



**Рис. 11 / Fig. 11.** Положение центра давления фюзеляжа относительно угла атаки / Position of the fuselage center of pressure relative to the angle of attack

*Источник: подготовлено авторами*

На рис.12 представлена погрешность вычислений аэродинамических характеристик фюзеляжа относительно данных SUNSHyNE, вычисленной по формуле (9). Большая погрешность для малых углов атаки, вероятно, обусловлена некорректным выбором моделирования донного давления как в случае предлагаемой методики EARL, так и методов, приведённых для сравнения. Из рис. 12 видно, что методика EARL предоставляет более точные результаты моделирования коэффициентов лобового сопротивления и подъёмной силы для тела Сирс-Хаака.



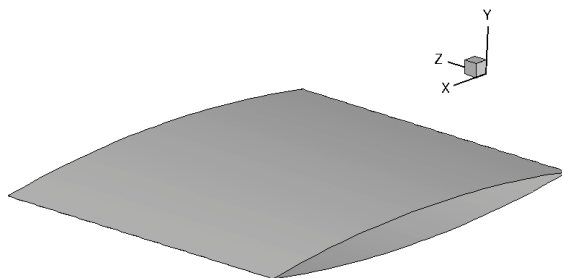
**Рис. 12 / Fig. 12.** Погрешность вычислений относительно результатов SUNSHyNE для коэффициентов а) лобового сопротивления и б) подъёмной силы фюзеляжа / Calculation error relative to SUNSHyNE results for the coefficients of а) drag and б) lift of the fuselage

*Источник: подготовлено авторами*

Расчёт с помощью методики EARL проводился для диапазона углов атаки от  $-180^\circ$  до  $180^\circ$  с шагом  $5^\circ$  и для чисел Маха 1.5., 2., 2.5, 3. Общее количество расчётных точек составляет 292 шт. Обработка всех расчётных точек исследуемого тела, состоящего из 10 тыс. треугольников, на процессоре Intel Core i5-9300HF, 2.40GHz заняла 1 секунду.

#### Крылообразное тело

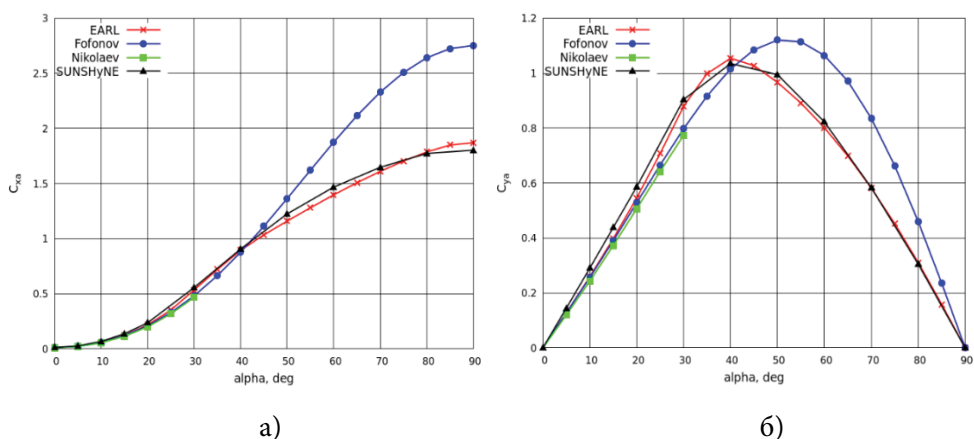
Рассмотрим результаты вычисления АДХ для крылообразного тела, в качестве которого используется профиль крыла с симметричным профилем, образованным дугами с хордой 13,2 м и высотой дуги, равной 0,5 м (рис. 13). Координаты контура профиля крыла соответствуют данным в табл. 1 приложения А. Ширина крыла составляет 10 м. Характерная площадь равна площади крыла в плане  $S_{ref} = 132 \text{ м}^2$ .



**Рис. 13 / Fig. 13.** Расчётная поверхность крыла с симметричным профилем /  
Calculated surface of a wing with a symmetrical profile

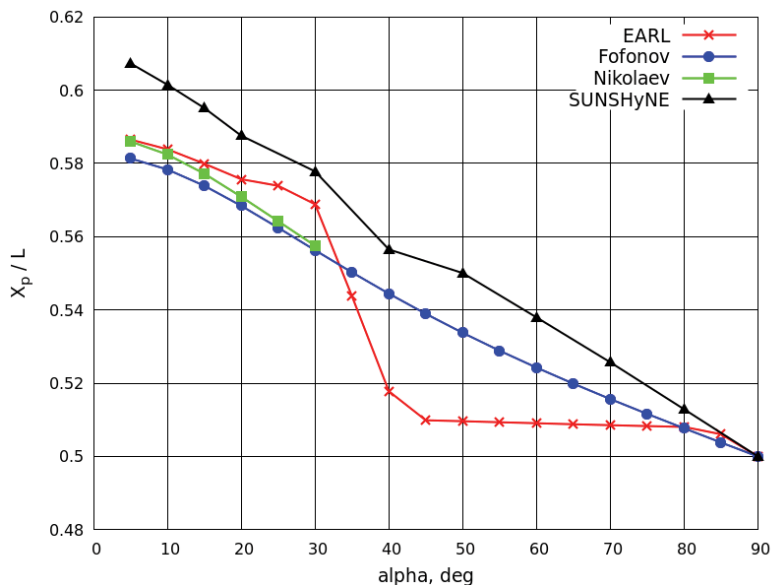
*Источник:* подготовлено авторами

На рис. 14, 15 представлено распределение коэффициентов лобового сопротивления и подъёмной силы, а также положение центра давления в зависимости от угла атаки для числа Маха, равного  $M_\infty = 3$ . Из графиков на рис. 16 видно, что АДХ, полученные с помощью методики EARL, имеют лучшее совпадение с результатами численного моделирования. Уменьшение величины погрешности в сравнении с рис. 10, 12 у моделей Николаева В. С и Фофонова Д. М. относительно численного расчёта связано с формой исследуемого тела. Поток на поверхности исследуемого крыла можно рассматривать как плоскопараллельное течение. В этом случае достаточным будет использовать стандартные соотношения на ударной волне для клина и формулы, описывающие течение Прандтля-Майера на наветренной и подветренной сторонах соответственно. Однако предположение о больших сверхзвуковых скоростях полёта даёт более грубую оценку АДХ при сравнении с EARL.



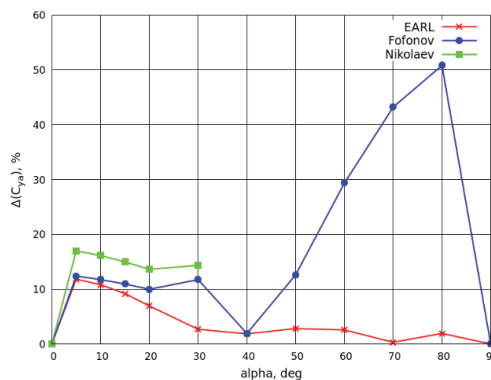
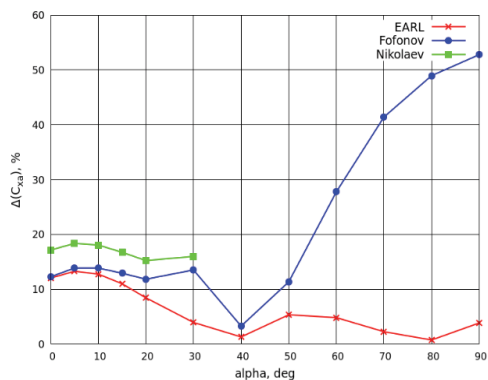
**Рис. 14 / Fig. 14.** Зависимость коэффициентов а) лобового сопротивления и б) подъемной силы от угла атаки для крыла / The dependence of the coefficients of а) drag and б) lift on the angle of attack for a wing

*Источник:* подготовлено авторами



**Рис. 15 / Fig. 15.** Положение центра давления крыла относительно угла атаки, вычисленное согласно (10) / The position of the wing's center of pressure relative to the angle of attack, calculated according to (10)

Источник: подготовлено авторами



а)

б)

**Рис. 16 / Fig. 16.** Погрешность вычислений относительно результатов SUNSHyNE для коэффициентов а) лобового сопротивления и б) подъёмной силы / Calculation error relative to SUNSHyNE results for the coefficients of а) drag and б) lifting force

Источник: подготовлено авторами

Расчёт с помощью EARL проводился для диапазона углов атаки от  $-180^\circ$  до  $180^\circ$  с шагом  $5^\circ$  и для чисел Маха 1.5, 2., 2.5, 3. Общее количество расчётных точек составляет 292 шт. Обработка всех расчётных точек исследуемого тела, состоящего из 6 тыс. треугольников, на процессоре Intel Core i5-9300HF, 2.40GHz занял 5 секунд. Увеличение счётного времени в сравнении с вычислениями АДХ для тела Сирс-Хаака при меньшем количестве треугольников связано с использованием метода бисекции при вычислении давления согласно теории Прандтля-Майера.

### **Выводы**

В работе представлена методика по расчёту АДХ летательных аппаратов при малых сверхзвуковых скоростях полёта EARL, основанная на гипотезе локальности и гибко сочетающая методы расчёта давления в рамках теории сверхзвукового обтекания пластины с учётом разной кривизны поверхности. В рамках верификации представленной методики при сравнении с существующими методами, а также результатами численного моделирования было продемонстрировано наилучшее совпадение среди всех рассматриваемых методов относительно результатов численного моделирования.

Время расчёта с использованием методики EARL для фюзеляже- и крылообразных тел на процессоре Intel Core i5-9300HF, 2.40GHz составляет порядка 1–5 секунд для порядка 300 расчётных точек с числом треугольников до 10 тыс. Целесообразно использовать предлагаемую методику для определения АДХ сверхзвукового летательного аппарата на первоначальном этапе выбора перспективной аэродинамической компоновки.

Рассматриваемую методику планируется дополнить корректным моделированием донного давления, отсутствие которого вносит значительную погрешность для фюзеляжеобразных тел на малых углах атаки. Также планируется разработать подход для моделирования сопротивления трения, однако такая задача представляется неоднозначной в рамках локального подхода, в котором отсутствуют линии тока, что затрудняет расчёт пограничного слоя.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

Таблица 1 / Table 1.

**Координаты точек тела Сирс-Хаака / Coordinates of the Sears-Haack body points**

$X/L$	$Y$	$X/L$	$Y$
0	0	0.26	0.82167
0.01	0.08877	0.28	0.85097
0.015	0.11986	0.3	0.87742
0.02	0.14816	0.32	0.90113
0.025	0.17448	0.34	0.92217
0.03	0.19928	0.36	0.9406
0.04	0.24535	0.38	0.95648
0.05	0.28778	0.4	0.96985
0.06	0.32734	0.42	0.98074
0.07	0.36453	0.44	0.98918
0.08	0.39967	0.46	0.9952
0.09	0.43302	0.48	0.9988
0.1	0.46476	0.5	1
0.11	0.49503	0.54	0.9952
0.12	0.52395	0.58	0.98074
0.13	0.55162	0.62	0.95648
0.14	0.57812	0.66	0.92217
0.15	0.6035	0.7	0.87742
0.16	0.62783	0.74	0.82167
0.17	0.65116	0.78	0.75411
0.18	0.67353	0.82	0.67353
0.19	0.69498	0.86	0.57812
0.2	0.71554	0.9	0.46476
0.22	0.75411	0.95	0.28778
0.24	0.78943	1	0

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Gentry A. E., Smyt D. N., Oliver W. R. The Mark-IV supersonic-hypersonic arbitrary-body program. Volume I. User's Manual: Technical report. AFFDL-TR-159. Ohio, U. S.: Air Force Flight Dynamics Laboratory, Douglas Aircraft Company, 1973. 269 p.
2. Абрамович Ю. В., Широкопояс Е. П. Инженерная методика расчета на ЭВМ аэродинамических характеристик летательных аппаратов при гиперзвуковых скоростях полета // Труды ЦАГИ. 1974. Вып. 1580. С. 3–29.
3. Галкин В. С., Ерофеев А. И., Толстых А. И. Приближенный метод расчета аэродинамических характеристик тел в гиперзвуковом потоке разреженного газа // Труды ЦАГИ. 1977. Вып. 1833. С. 6–10.
4. An approximate method of aerodynamic calculation of complex shape bodies in a transition region / V. M. Kotov, E. N. Lychkin, A. G. Reshetin, A. N. Schelkonogov // Rarefied gas Dynamics: Proceedings of 13th International Conference (Novosibirsk). Vol. 1. New York: Plenum press, 1982. P. 487–495.
5. Potter J. L., Peterson S. W. Local bridging to predict aerodynamic coefficients in hypersonic, rarefied flow // Journal of Spacecraft and Rockets. 1992. Vol. 29. No. 3. P. 344–351.
6. Free-molecular and transitional aerodynamics of spacecraft / H. Klinkrad, G. Koppenwallner, D. Johannsmeier, M. Ivanov, A. Kashkovsky // Advances in Space Research. 1995. Vol. 16. Iss. 12. P. 33–36. DOI: 10.1016/0273-1177(95)98775-J.
7. Мирошин Р. Н., Халидов И. А. Теория локального взаимодействия. Л.: Издательство Ленинградского университета, 1991. 273 с.
8. High-Altitude Capsule aerodynamics with Real Gas Effects / M. S. Ivanov, G. N. Markelov, S. F. Gimelshein, L. V. Mishina, A. N. Krylov, N. V. Grechko // Journal of Spacecraft and Rockets. 1998. Vol. 35. Iss. 1. P. 16–22. DOI: 10.2514/3.26992.
9. Кашковский А. В., Ващенко П. В., Иванов М. С. Программная система для расчета аэродинамики космических аппаратов // Теплофизика и аэромеханика. 2008. Т. 15. № 1. С. 79–91.
10. Khlopkov Yu. I., Zay Yar Myo Myint, Khlopkov A. Yu. Aerodynamic Investigation for Prospective Aerospace Vehicle in the Transitional Regime // International Journal of Aeronautical and Space Sciences. 2013. Vol. 14. No. 3, P. 215–221. DOI: 10.5139/IJASS.2013.14.3.215.
11. Хлопков Ю. И., Зея М., Хлопков А. Ю. Моделирование аэродинамики перспективных аэрокосмических летательных аппаратов // Фундаментальные исследования. 2015. № 4. С. 152–156.
12. Anderson J. D. Hypersonic and high-temperature gas dynamics; 2nd ed. Reston: AIAA, 2006. 813 p.
13. Абрамович Г. Н. Прикладная газовая динамика: в 2 ч. Ч. 1. Учебное руководство: для вузов; 5-е изд., перераб. и доп. М.: Наука, 1991. 600 с.
14. Дейч М. Е. Техническая газодинамика; изд. 2-е, перераб. М. - Л.: Госэнергоиздат, 1961. 670 с.

15. Численное и физическое моделирование сверхзвукового обтекания разделяющихся крылатых тел / Н. П. Адамов, М. Д. Бродецкий, А. М. Харитонов, А. В. Забродин, А. Е. Луцкий // Теплофизика и аэромеханика. 2000. Т. 7. № 1. С. 1–12.
16. Simon W. E., Walter L. A. Approximations for supersonic flow over cones // AIAA Journal. 1963. Vol. 1. Iss. 7. P. 1696–1698. DOI: 10.2514/3.1899.
17. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. М.: Дрофа, 2003. 840 с.
18. Биматов В. И., Савкина Н. В., Фарапонов В. В. Сверхзвуковое обтекание и аэродинамические характеристики острого конуса для различных моделей турбулентной вязкости // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2016. № 5 (43). С. 35–42. DOI: 10.17223/19988621/433/4.
19. Николаев В. С. Аппроксимационные формулы для локальных аэродинамических характеристик тел типа крыла в вязком гиперзвуковом потоке в широком диапазоне параметров подобия // Ученые записки ЦАГИ. 1981. Т. 12. № 4. С. 143–150.
20. Фофанов Д. М. Оптимизация аэродинамической компоновки гиперзвуковых летательных аппаратов // Космонавтика и ракетостроение. 2010. № 1 (58). С. 17–26.
21. Программный комплекс SUNSHYNE для моделирования течений сжимаемого газа на вычислительных системах гибридной архитектуры / А. А. Шершнев, А. Н. Кудрявцев, А. В. Кашковский, Г. В. Шоев, С. П. Борисов и др. // Прикладная механика и техническая физика. 2025. № 5 (393). С. 157–177. DOI: 10.15372/PMTF202515704.
22. Stivers L. S., Jr. Calculated Pressure Distributions and Components of Total-Drag Coefficients for 18 Constant-Volume, Slender Bodies of Revolution at Zero Incidence for Mach Numbers from 2 to 12 with Experimental Aerodynamic Characteristics for Three of the Bodies: Report no. NASA TN D-6536. Moffett Field, CA, United States: Ames Research Center, 1971. 100 p.

## REFERENCES

1. Gentry, A. E., Smyt, D. N. & Oliver, W. R. (1973). *The Mark-IV supersonic-hypersonic arbitrary-body program. Volume I. User's Manual: Technical report. AFFDL-TR-159*. Ohio, U. S.: Air Force Flight Dynamics Laboratory, Douglas Aircraft Company.
2. Abramovich, Yu. V. & Shirokopoyas, E. P. (1974). Engineering Methodology for Computer Calculation of Aerodynamic Characteristics of Aircraft at Hypersonic Flight Speeds. In: *Proceedings of TsAGI (Central Aerohydrodynamic Institute)*, 1580, 3–29 (in Russ.).
3. Galkin, B. S., Erofeev, A. I. & Tolstykh, A. I. (1977). Approximate Method for Calculating Aerodynamic Characteristics of Bodies in a Hypersonic Rarefied Gas Flow. In: *Proceedings of TsAGI (Central Aerohydrodynamic Institute)*, 1833, 6–10 (in Russ.).
4. Kotov, V. M., Lychkin, E. N., Reshetin, A. G. & Schelkonogov, A. N. (1982). An approximate method of aerodynamic calculation of complex shape bodies in a transition region. In: *Rarefied Gas Dynamics: Proceedings of 13th International Conference (Novosibirsk)*. Vol. 1. New York: Plenum press, pp. 487–495.

5. Potter, J. L. & Peterson, S. W. (1992). Local bridging to predict aerodynamic coefficients in hypersonic, rarefied flow. In: *Journal of Spacecraft and Rockets*, 29 (3), 344–351.
6. Klinkrad, H., Koppenwallner, G., Johannsmeier, D., Ivanov, M. & Kashkovsky, A. (1995). Free-molecular and transitional aerodynamics of spacecraft. In: *Advances in Space Research*, 16 (12), 33–36. DOI: 10.1016/0273-1177(95)98775-J.
7. Miroshin, R. N. & Khalidov, I. A. (1991). *Theory of local interaction*. Leningrad: Leningrad University publ. (in Russ.).
8. Ivanov, M. S., Markelov, G. N., Gimelshein, S. F., Mishina, L. V., Krylov, A. N. & Grechko, N. V. (1998). High-Altitude Capsule aerodynamics with Real Gas Effects. In: *Journal of Spacecraft and Rockets*, 35 (1), 16–22. DOI: 10.2514/3.26992.
9. Kashkovsky, A. V., Vashchenkov, P. V. & Ivanov, M. S. (2008). Software system for computing spacecraft aerodynamics. In: *Thermophysics and Aeromechanics*, 15 (1), 79–91 (in Russ.).
10. Khlopkov, Yu. I., Zay, Yar Myo Myint & Khlopkov, A. Yu. (2013). Aerodynamic Investigation for Prospective Aerospace Vehicle in the Transitional Regime. In: *International Journal of Aeronautical and Space Sciences*, 14 (3), 215–221. DOI: 10.5139/IJASS.2013.14.3.215.
11. Khlopkov, Y. I., Zay, Yar Myo Myint & Khlopkov, A. Y. (2015). Modelling of aerodynamics for perspective aerospace vehicles. In: *Fundamental Research*, 4, 152–156 (in Russ.).
12. Anderson, J. D. (2006). *Hypersonic and high-temperature gas dynamics*. Reston: AIAA.
13. Abramovich, G. N. (1991). *Applied Gas Dynamics: in 2 parts. Part 1. Textbook: For technical universities*. Moscow: Nauka publ. (in Russ.).
14. Deich, M. E. (1961). *Technical gas dynamics*. Moscow, Leningrad: Gosenergoizdat publ. (in Russ.).
15. Adamov, N. P., Brodetsky, M. D., Kharitonov, A. M., Zbrodin, A. V. & Lutsky, A. E. (2000). Numerical and physical modeling of supersonic flow around separating winged bodies. In: *Thermophysics and Aeromechanics*, 7 (1), 1–12 (in Russ.).
16. Simon, W. E. & Walter, L. A. (1963). Approximations for supersonic flow over cones. In: *AIAA Journal*, 1 (7), 1696–1698. DOI: 10.2514/3.1899.
17. Loitsyansky, L. G. (2003). *Mechanics of liquids and gases*. Moscow: Drofa publ. (in Russ.).
18. Bimatov, V. I., Savkina, N. V. & Faraponov, V. V. (2016). Supersonic flow over a sharp cone and its aerodynamic characteristics for different models of turbulent viscosity. In: *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*, 5 (43), 35–42. DOI: 10.17223/19988621/433/4.
19. Nikolaev, V. S. (1981). Approximation formulas for local aerodynamic characteristics of wing-type bodies in a viscous hypersonic flow in a wide range of similarity parameters. In: *Proceedings of TsAGI (Central Aerohydrodynamic Institute)*, 12 (4), 143–150 (in Russ.).
20. Fofonov, D. M. (2010). Aerodynamic configuration optimization of hypersonic flying vehicles. In: *Cosmonautics and Rocket Science*, 1 (58), 17–26 (in Russ.).
21. Shershnev, A. A., Kudryavtsev, A. N., Kashkovsky, A. V. et al. (2025). SUNSHYNE Software for Modeling Compressible Gas Flows on Computer Systems with Hybrid

- CPU/GPU Architecture. In: Journal of Applied Mechanics and Technical Physics, 66, 961–978. DOI: 10.1134/S002189442570052X.
22. Stivers, L. S., Jr. (1971). *Calculated Pressure Distributions and Components of Total-Drag Coefficients for 18 Constant-Volume, Slender Bodies of Revolution at Zero Incidence for Mach Numbers from 2 to 12 with Experimental Aerodynamic Characteristics for Three of the Bodies: Report no. NASA TN D-6536*. Moffett Field, CA, United States: Ames Research Center.

---

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

*Полевщиков Данила Павлович* (г. Новосибирск) – инженер-исследователь лаборатории № 7 Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук;  
ORCID: 0009-0006-8994-9774; e-mail: polevshchikov@itam.nsc.ru

*Кашковский Александр Владимирович* (г. Новосибирск) – кандидат технических наук, старший научный сотрудник, лаборатории № 7 Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук;  
ORCID: 0000-0001-7169-5602; e-mail: sasa@itam.nsc.ru

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Danila P. Polevshikov* (Novosibirsk) – Research Engineer, Laboratory No. 7, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the RAS;  
ORCID: 0009-0006-8994-9774; e-mail: polevshchikov@itam.nsc.ru

*Aleksandr V. Kashkovsky* (Novosibirsk) – Cand. Sci. (Engineering), Senior Researcher, Laboratory No. 7, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the RAS;  
ORCID: 0000-0001-7169-5602; e-mail: sasa@itam.nsc.ru

**Научная статья****УДК 577.3, 573.7, 549.212****DOI 10.18384/2949-5067-2025-4-200****МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ КЛАСТЕРОВ ГРАФЕНА И  
ОКСИДА ГРАФЕНА В РАСТВОРЕ И У ПОВЕРХНОСТИ БАКТЕРИАЛЬНЫХ  
ВНУТРИКЛЕТОЧНЫХ ПОЛИМЕРОВ*****Терешкин Э. В.\*, Терешкина К. Б., Крупянский Ю. Ф.****Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова  
Российской академии наук, г. Москва, Российская Федерация**\*Корреспондирующий автор, e-mail: ramt@mail.ru**Поступила в редакцию 23.09.2025**Принята к публикации 3.10.2025***Аннотация**

**Цель:** выявить особенности динамического поведения гексагональных наночастиц графена и оксида графена в растворе и у поверхности комплексов дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК) с ДНК-стабилизирующим белком Dps.

**Процедура и методы.** На основании квантово-химических расчётов определены структуры, парциальные заряды и другие параметры молекулярно-динамических силовых полей для гексагональных наночастиц графена с разным количеством кислород-содержащих групп. Используя полноатомное приближение, методами молекулярной динамики проведены расчёты динамики графеновых наночастиц в растворе и у поверхности бактериальных биополимеров.

**Результаты.** Показано, что наночастицы графена и оксида графена образуют кластеры в растворе и у поверхности белков и ДНК. Показано, что графеновые наночастицы могут оказывать влияние на динамику ДНК и ДНК-связывающего белка Dps, приводя к изменениям в структуре комплексов ДНК – белок.

**Теоретическая и практическая значимость.** Полученные данные представляют практический интерес для исследователей структуры биологических молекул и их комплексов при воздействии графеновых наночастиц графена, оксида графена, восстановленного оксида графена. Также данные могут быть использованы при создании наноматериалов с заданными свойствами, которые сочетают нано-биоинтерфейс.

**Ключевые слова:** взаимодействие биомолекул с графеном, наноматериал, графен, оксид графена, бактериальный белок, молекулярная динамика, электростатический потенциал

**Благодарности.** Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (№ 125012200614-6).

**Для цитирования:**

Терешкин Э. В., Терешкина К. Б., Крупянский Ю. Ф. Молекулярно-динамические расчёты кластеров графена и оксида графена в растворе и у поверхности бактериальных внутриклеточных полимеров // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 4. С. 42–58. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-200>.

**Original research article****MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF GRAPHENE AND GRAPHENE OXIDE CLUSTERS IN SOLUTION AND AT THE SURFACE OF BACTERIAL INTRACELLULAR POLYMERS*****E. Tereshkin\*, K. Tereshkina, Y. Krupyanskii****N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation**\*Corresponding author, e-mail: ramm@mail.ru**Received by the editorial office 23.09.2025**Accepted for publication 3.10.2025***Abstract**

**Aim** is to identify the features of the dynamic behavior of hexagonal graphene and graphene oxide nanoparticles in solution and at the surface of deoxyribonucleic acid (DNA) complexes with the DNA-binding protein Dps.

**Methodology.** Based on quantum chemical calculations, the structures, partial charges, and other parameters of molecular dynamics force fields for hexagonal graphene nanoparticles with varying numbers of oxygen-containing groups were determined. Using the all-atom approximation, molecular dynamics simulations were performed to obtain the dynamics of graphene nanoparticles in solution and at the surface of bacterial biopolymers.

**Results.** Graphene and graphene oxide nanoparticles have been shown to form clusters in solution and at the surface of proteins and DNA. Graphene nanoparticles can influence the dynamics of DNA and the DNA-binding protein Dps, leading to changes in the structure of DNA-protein complexes.

**Research implications.** The obtained data are of practical interest to researchers studying the structure of biological molecules and their complexes exposed to graphene nanoparticles (graphene, graphene oxide, and reduced graphene oxide). These data can also be used to create nanomaterials with tailored properties that combine nano-biointerfaces.

**Keywords:** interaction of biomolecules with graphene, nanomaterial, graphene, graphene oxide, bacterial protein, molecular dynamics, electrostatic potential

**Acknowledgments.** Research was performed within frameworks of the state tasks for FRC CP RAS of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (125012200614-6).

**For citation:**

Tereshkin, E. V., Tereshkina, K. B. & Krupyanskii, Y. F. (2025). Molecular dynamics simulation of graphene and graphene oxide clusters in solution and at the surface of bacterial intracellular polymers. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 4, pp. 42–58. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-200>.

**Введение**

В последнее время теоретическое и экспериментальное исследование наночастиц [1] находит всё более широкое распространение не только в физике, но и в применении к биологическим материалам и медицинским методикам. Наноматериалы используются в биологии и медицине для обнаружения биологических молекул, визуализации, в качестве терапевтических агентов [2].

Особый интерес вызывают их характеристики: высокое соотношение поверхности к объёму, размер частиц от 1 нм, большая специфичность, особенности взаимодействия с биоматериалами.

Существует множество типов наночастиц, различающихся по форме, размеру, составу и функциональным возможностям [3]. Наночастицы можно разделить на различные типы в зависимости от их субъединиц, например, металлические (оксид алюминия, золото, оксид меди, серебро, оксид цинка, оксид железа, оксид титана и т. д.), неметаллические (например, наночастицы на основе углерода) и полимерные наночастицы. Для биомедицинских приложений особое значение имеют наночастицы на основе липосом (сферические везикулы, образованные путём самоорганизации липидов в растворе и содержащие один или несколько бислоёв), альбуминовые гидрофильные наночастицы (на основе белка альбумина, внутрь кристаллов которого инкапсулируются гидрофобные лекарства для доставки), полимерные наночастицы (на основе биосовместимых и биоразлагаемых полимеров), суперпарамагнитные наночастицы оксида железа (SPION), квантовые точки (Нобелевская премия по химии 2023 г.), наночастицы из золота и серебра. Биомедицинский интерес вызывают наночастицы небольшого размера, так как они обычно обладают более высокой антибактериальной активностью относительно крупных наночастиц благодаря своей способности проникать в клетку и подавлять рост бактерий, как связываясь самостоятельно с важными для клетки биополимерами, так и способствуя образованию активных форм кислорода [4].

Одним из перспективных классов материалов для биомедицинских применений являются углеродные наноматериалы [5]. Наночастицы на основе углерода могут иметь различные физические и морфологические характеристики, в основном из-за их расположения. Их можно в целом классифицировать на углеродное нановолокно, технический углерод, углеродные нанотрубки [6; 7], графен/оксид графена [8], фуллерены [9]. Углеродные наноматериалы могут проявлять значительную антимикробную активность, особенно в нанокompозитных формах, что важно для биомедицины, пищевой промышленности и других областей народного хозяйства.

Целью данного исследования было изучение динамики наночастиц графена в растворе и у поверхности биомолекул (ДНК и белка). Из-за особой роли в защите клеток от стрессов был выбран ДНК-связывающий белок Dps (DNA-binding protein from starved cells) бактерии кишечной палочки (*Escherichia coli*, *E. coli*) [10; 11]. Выбор данного белка обусловлен важнейшими биологическими функциями – защита ДНК в стрессовых для бактериальных клеток условиях и удаление ядовитых форм железа  $Fe^{2+}$ , благодаря которым он обеспечивает выживание бактериальных клеток в критических условиях [12], и богатыми перспективами использования этого белка как наноматериала [8; 13–15].

Методами квантовой химии в программе FIREFLY 8.2.0<sup>2</sup> рассчитаны равновесные геометрии наночастиц графена, его оксидов [16] и охарактеризованы парциальные заряды на атомах. Методами классической молекулярной динамики (МД) в программном комплексе GROMACS [17] с использованием полноатомных силовых полей исследованы процессы кластерообразования частиц графена в водном растворе с ионной силой, имитирующей цитоплазму бактериальной клетки *E. coli* [18]. Выбраны модели неокисленного графена и оксида графена, конформационная динамика которых изучена в расчётной ячейке с белком Dps и ДНК.

### Методы и модели

В классическом методе молекулярной динамики по мере расчёта траектории происходит решение уравнения Ньютона для  $N$  взаимодействующих атомов:

$$m_i \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \mathbf{F}_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

Здесь  $m_i$  – масса атома,  $\mathbf{r}_i$  – радиус-вектор атома,  $\mathbf{F}_i$  – действующая на атом сила, которая является отрицательной производной потенциала  $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ :

$$\mathbf{F}_i = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (2)$$

Действующая на атом  $i$  сила вычисляется путём расчёта суммы:

$$\mathbf{F}_i = \sum_j \mathbf{F}_{ij} + \sum_k \mathbf{F}_{ik} + \sum \mathbf{F}_{ex} \quad (3)$$

Здесь  $\mathbf{F}_{ij}$  – сила между атомом  $i$  и не связанными с ним ковалентными атомами в пределах радиусов отсечки;  $\mathbf{F}_{ik}$  – сила между атомом  $i$  и связанными с ним атомами в пределах ковалентной связи, валентного угла и двугранных углов;  $\mathbf{F}_{ex}$  – различные внешние силы.

Для нахождения сумм сил, действующих на атом со стороны не связанных и связанных с ним атомов, силовое поле содержит данные о потенциалах. В наших исследованиях используются силовые поля группы AMBER [19], в которых потенциал содержит следующие члены:

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = & \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{q_i q_j}{\epsilon r_{ij}} + \sum_i \sum_{j \neq i} 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \\ & + \sum_{ij} k_{b,ij} (r_{ij} - r_{0,ij})^2 + \sum_{ijk} k_{a,ijk} (\alpha_{ijk} - \alpha_{0,ijk})^2 + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} k_{d,ijkl} [1 + \cos(n\varphi_{ijkl} - \varphi_{0,ijkl})] \end{aligned} \quad (4)$$

<sup>2</sup> Granovsky A. A. Firefly version 8 [Электронный ресурс]. URL: <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html> (дата обращения: 02.02.2024).

Здесь первые два слагаемых относятся к несвязанным атомам (электростатический потенциал и потенциал Леннарда-Джонса), остальные три – к связанным атомам (потенциал для ковалентных связей, потенциал для валентных углов, потенциал для торсионных, псевдоторсионных углов и плоских групп). Индексы  $i, j, k, l$  относятся к разным атомам системы;  $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ , где  $\mathbf{r}_i$  и  $\mathbf{r}_j$  – радиус-векторы атомов;  $q_i$  и  $q_j$  – их парциальные заряды,  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость среды;  $\epsilon_{ij}$  и  $\sigma_{ij}$  – параметры Леннарда-Джонса;  $k_{b,i}, k_{a,ij}, k_{d,ijkl}$  – силовые постоянные для ковалентных связей, валентных углов и торсионных углов (псевдоторсионных углов, плоских групп);  $r_0, \alpha_0, \varphi_0$  – равновесные длины связей и углов;  $n$  – кратность торсионного угла.

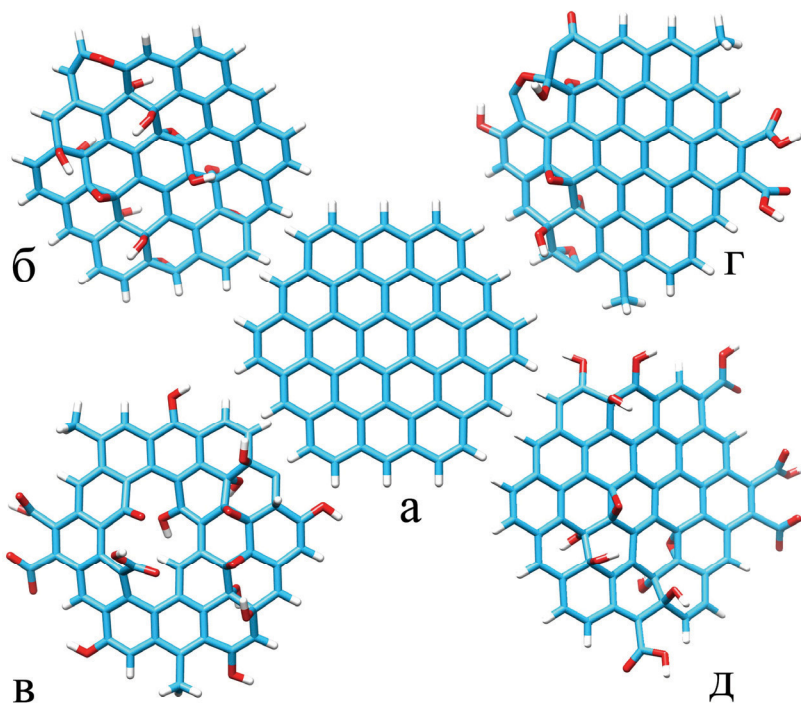
Выражение (4) представляет собой аппроксимацию квантово-механической поверхности потенциальной энергии как функции координат атомов  $\{r_i\}$ , которая может быть вычислена квантово-химическими методами *ab initio*. Константы  $k_{b,i}, k_{a,ij}, k_{d,ijkl}, \epsilon_{ij}, \sigma_{ij}, r_0, \alpha_0, \varphi_0$  из выражения (4) стандартизированы в силовом поле в зависимости от типов атомов. Тип атома в молекуле определяется его химическим элементом и химическим окружением (тип связи, гибридизация, соседние атомы, связанные ковалентной связью или посредством валентного угла), которые обуславливают энергетику взаимодействий между атомами. Константы содержатся в используемом силовом поле в табличном виде и используются при подготовке систем к расчёту. Для классического силового поля парциальные заряды на атомах  $q_i, q_j$  также постоянны на протяжении всего расчёта. Но их значения не зависят от типа атома, а определяются квантово-химически для каждой конкретной молекулы или её части. Таким образом, для подготовки молекулы к расчёту необходимо сопоставить каждый атом этой молекулы определённому типу атомов силового поля согласно его описанию. Для новых молекул нужно помимо этого получить парциальные заряды на атомах, которые будут использоваться в МД-расчётах.

Молекулы белка и ДНК состоят из стандартных частей – аминокислотных остатков (белки) или нуклеотидов (ДНК), – для которых типы атомов и парциальные заряды известны, поэтому входные файлы для МД в нашей работе были получены на основе трёхмерной структуры этих молекул с помощью стандартной утилиты *pdb2gmx* программного комплекса GROMACS. Было выбрано силовое поле AMBER99-PARMBSC1 [20] семейства AMBER. AMBER – семейство силовых полей для расчётов биологических молекул. Обоснованием выбора силового AMBER99-PARMBSC1 поля служило то, что оно наиболее полно описывает поведение ДНК. Трёхмерная структура молекулы ДНК (25 пар нуклеотидов) была построена в В-форме с использованием пакета UCSF Chimera. Белок Dps бактерии *Escherichia coli* моделировался на основе структуры PDB ID: 8OUC.

В работе исследовались гексагональные наночастицы графена (далее обозначается как G) и четыре вида его оксидов (обозначены GO, GOa, GOb, GOc), содержащие 54 атома углерода (рис. 1). В моделях оксида графена

добавлялись кислородсодержащие группы согласно данным твердотельной спектроскопии ЯМР [16].

Для поиска трёхмерной структуры и парциальных зарядов на атомах графена нами были проведены квантово-химические расчёты в программе FIREFLY 8.2.0. Неэмпирические расчёты электронной структуры наночастиц проводились методом Хартри-Фока (HF). Атомные орбитали описывались базисным набором 6-31G (d,p). Для аппроксимации электростатического потенциала с целью нахождения парциальных зарядов на атомах использован алгоритм GEODESIC [21]. Параметризация наночастиц графена для силового поля GAFF2 семейства AMBER проводилась с использованием программы ACPYPE (AnteChamber Python Parser interface v. 2023.10.27 для Linux Ubuntu 24.04 LTS) [22] в части сопоставления типов атомов, на основании которых также с помощью этой программы автоматически выбирались соответствующие константы. Силовое поле GAFF2 (General AMBER Force Field 2) [23] рекомендуется использовать для расчётов органических молекул при их исследованиях с белками и ДНК.



**Рис. 1 / Fig. 1.** Модели графена (а) и его оксидов (б-д), содержащих 54 атома углерода.

Голубой – атомы углерода, красный – кислорода, серый – водорода. Названия наночастиц, используемые далее: (а) G, (б) GO, (в) GOc, (г) GOб, (д) GOa / Models of graphene (a) and graphene oxides (b-d) of 54 carbon atoms. Carbon atoms are blue, oxygens are red, hydrogens are gray. The names of nanoparticles used below are: (a) G, (б) GO, (в) GOc, (г) GOб, (д) GOa.

*Источник:* подготовлено авторами

Состав МД-систем представлен в табл. 1. Использованы периодические граничные условия. Перед началом расчёта траекторий методом наискорейшего спуска проводилась минимизация потенциальной энергии систем. Затем системы релаксировались в NVT и NPT ансамблях по 100 пс. Постоянная температура поддерживалась стохастическим (ланжевенновским) термостатом с постоянной трения 0.5 пс-1 и составляла 301К для частиц графена в растворе и 313К для белка-ДНК-графена. Постоянное давление 1 атм. поддерживалось изотропным способом с помощью баростата Парринелло-Рамана (постоянная времени 2 пс). Ближние взаимодействия и взаимодействия связанных атомов рассчитывались каждый шаг. Метод суммирования по Эвальду (PME) использовался для расчёта электростатических взаимодействий на больших расстояниях. Радиусы отсечки (обрезания) брались равными 1.5 нм для всех типов взаимодействий. Список соседей поддерживался с помощью схемы отсечки Верле и обновлялся каждые 10 фс. Быстрые степени свободы ограничивались с помощью алгоритма LINCS. Шаг интегрирования составлял 2 фс, длина траекторий – 0.1 мкс.

Таблица 1 / Table 1

**Состав молекулярно-динамических систем / Composition of molecular dynamics systems**

Номер системы	G/GO	Dps	ДНК	Вода	Ионы				
					Na <sup>+</sup>	Cl <sup>-</sup>	K <sup>+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	Ca <sup>2+</sup>
1	8 G, 8 GOa, 8GOb, 8GOc	-	-	40436 OPC	150	88	32	2	1
2	100 G	1	1	141141 SPC/E	480	424	-	-	20
3	100 GO	1	1	140567 SPC/E	480	424	-	-	20
4	-	1	1	90196	408	393	75	1	2

*Примечание:* Приведено число молекул белка Dps, ДНК, графена: G – графен (рис. 1а), GO – оксид графена (рис. 1б), GOa – оксид графена (рис. 1д), GOb – оксид графена (рис. 1г), GOc – оксид графена (рис. 1в). Указано количество и типы молекул воды и ионов.

*Note:* The number of molecules of Dps protein, DNA, and graphene is given: G – graphene (Fig. 1a), GO – graphene oxide (Fig. 1b), GOa – graphene oxide (Fig. 1d), GOB – graphene oxide (Fig. 1g), GOc – graphene oxide (Fig. 1v). The numbers and types of water molecules and ions are indicated.

## Результаты

Были рассчитаны молекулярно-динамические траектории движения графеновых наночастиц в растворе и вблизи белка Dps с ДНК.

Свободные энергии сольватации находились в виде выражения (5) с использованием программы gmx sasa [24] пакета GROMACS.

$$\Delta G_{solv} = \sum_i \Delta \sigma_i S_i \quad (5)$$

Здесь  $i$  – номер атома,  $\Delta \sigma_i$  – атомный параметр сольватации ( $\sigma_i$ ),  $S_i$  – доступная растворителю площадь поверхности атома (Solvent-accessible surface area, SASA).

Для расчёта энергий сольватации молекул, параметризованных в силовом поле GAFF2, в файл /gromacs/top/dgsolv.dat были добавлены строки с параметрами сольватации для атомов углерода (??? с 0.016), кислорода (??? о - 0.006) и водорода (??? h 0), которые отличаются от основных параметров силового поля AMBER только использованием строчных букв в типах атомов, где ??? обозначает любую молекулу (остаток), с, о, h – символы атомов, число – атомный параметр сольватации, т.е. свободная энергия сольватации в ккал/моль, приходящаяся на единицу доступной растворителю площади поверхности в  $\text{Å}^2$

В табл. 2 представлены полученные по результатам молекулярно-динамического моделирования значения параметров сольватации для наночастиц графена. Наихудшей растворимостью в воде обладает частица неокисленного графена. Растворимость оксидов графена зависит от процентного содержания кислородсодержащих групп (отношения числа атомов O/C), химической структуры и положения этих групп.

Таблица 2 / Table 2

**Параметры сольватации графеновых наночастиц / Parameters of graphene nanoparticles**

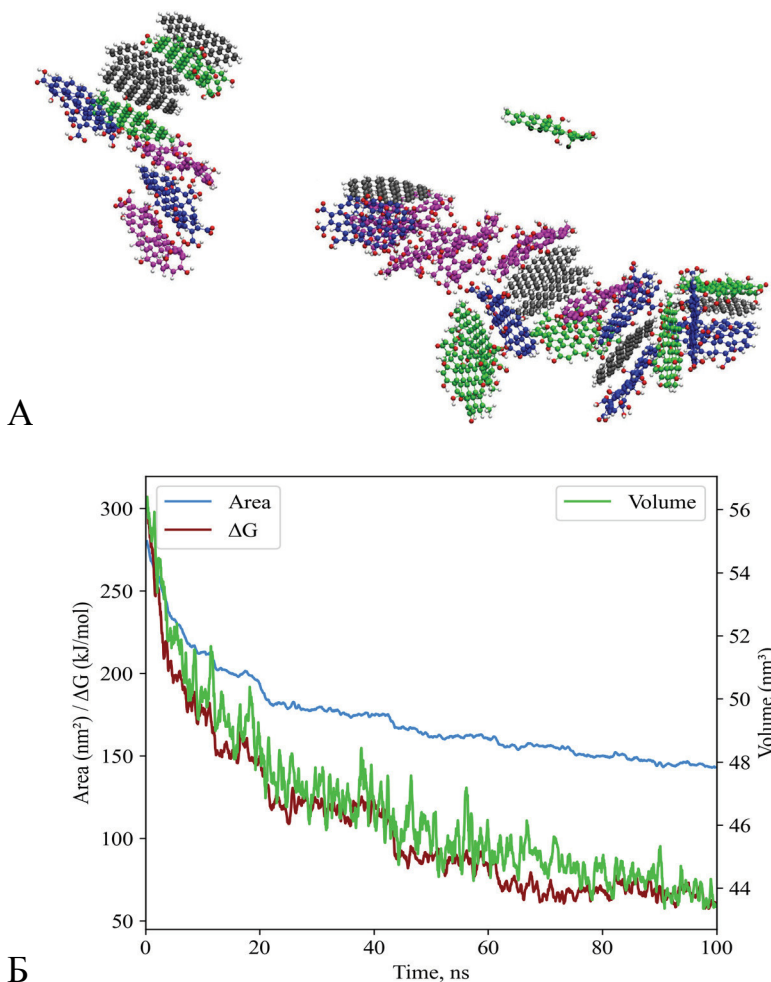
Название наночастицы	Химическая формула	Отношение числа атомов O/C, %	Доступная растворителю площадь поверхности (SASA), нм <sup>2</sup>	Исключённый объём, нм <sup>3</sup>	$\Delta G_{solv}$ , кДж/моль
G	C54H18	0	7.63±0.9	1.43±0.11	27.32±5.9
GO	C54H26O13	24.1	8.55±0.26	1.71±0.05	8.09±1.3
GOa	C58H22O17	29.3	9.88±0.31	1.93±0.05	4.56±2.1
GOб	C58H22O13	22.4	9.61±0.49	1.85±0.06	9.73±3.17
GOc	C57H28O18	31.6	9.88±0.28	1.97±0.05	1.99±1.32

Примечание: С – атом углерода, О – атом кислорода, Н – атом водорода.

Note: C – carbon atom, O – oxygen atom, H – hydrogen atom.

Графеновые частицы, в отличие от биополимеров, более гидрофобны. Белки, функционирующие в цитоплазме живой клетки, принимают такую третичную структуру, чтобы гидрофобные группы были экспонированы внутрь макромолекулы. В свою очередь, графеновые наночастицы в растворе кластеризуются таким образом, чтобы внутри кластера оказались более

гидрофобные, а снаружи – более гидрофильные частицы. На рис. 2А видно, что 32 графеновые частицы образовали 2 кластера – из 22 и 9 наночастиц, и одна

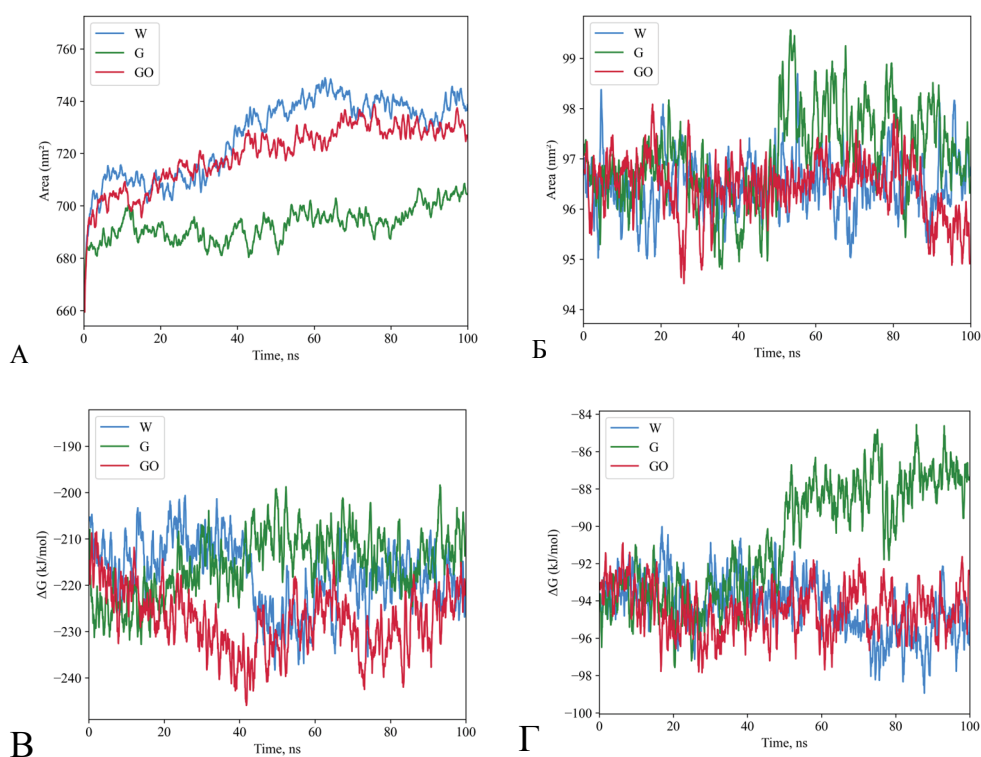


**Рис. 2 / Fig. 2.** А – Положение наночастиц графена в расчётной молекулярно-динамической ячейке в момент времени траектории 100 нс. Тёмно-серый – G, синий – GOa, зелёный – GOb, розовый – GOc, красные сферы – атомы кислорода, светло-серые – атомы водорода. Б – Параметры сольватации графеновых наночастиц в процессе кластеризации в растворе. Area (голубая кривая) – доступная растворителю площадь поверхности,  $\text{nm}^2$ ;  $\Delta G$  (коричневая кривая) – свободная энергия сольватации,  $\text{kJ/mol}$ ; Volume (зелёная кривая) – исключённый объём,  $\text{nm}^3$  / А – Snapshot of graphene nanoparticles in the periodic box at 100 ns time point. Dark gray – G, blue – GOa, green – GOb, pink – GOc, red spheres – oxygen atoms, light gray spheres – hydrogen atoms. Б – Solvation parameters of graphene nanoparticles during clustering in solution. Area (blue curve) – solvent-accessible surface area,  $\text{nm}^2$ ;  $\Delta G$  (brown curve) – free energy of solvation,  $\text{kJ/mol}$ ; Volume (green curve) – excluded volume,  $\text{nm}^3$ .

Источник: составлено авторами

наночастица окисленного графена GO не объединилась с другими молекулами графена. Частицы графена в кластерах удерживаются путём стеккинг-взаимодействий (чётко прослеживаются стопки молекул) и водородными связями между кислородсодержащими группами. Объединение наночастиц снижает свободную энергию сольватации и исключённый объём (рис. 2) относительно суммарных значений для отдельных частиц в воде.

Параметры сольватации белка Dps и ДНК изменяются в зависимости от состава раствора. Частицы графена G резко уменьшают доступную растворителю площадь поверхности белка (рис. 3). Главным образом это происходит за счёт окружения и блокировки подвижных N-концевых участков белка, которые несут 25 аминокислотных остатков каждой из 12 субъединиц

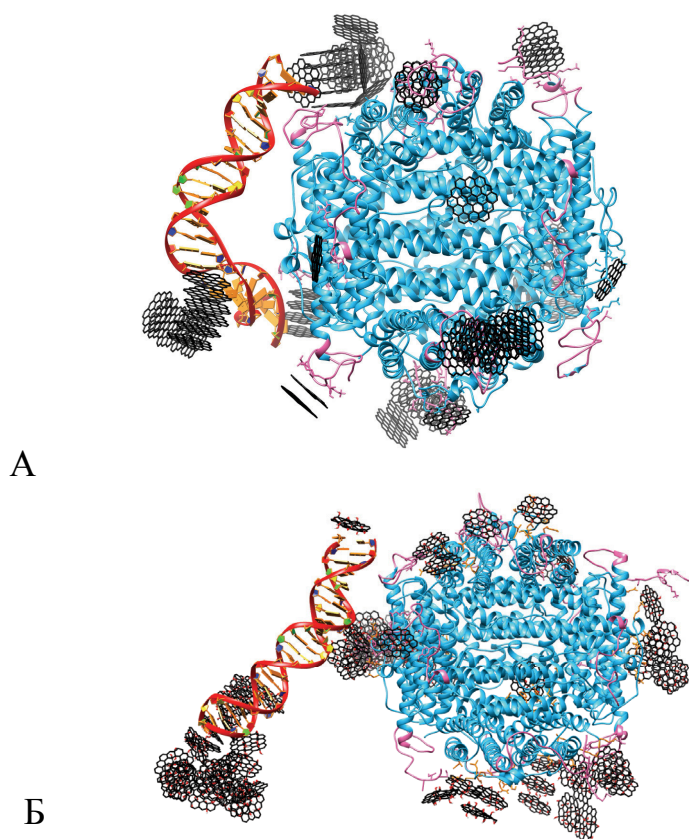


**Рис. 3 / Fig. 3.** Доступная растворителю площадь поверхности белка Dps (А), ДНК (Б). Свободная энергия сольватации белка Dps (В), ДНК (Г). Цвета кривых соответствуют составу раствора: без присутствия графеновых наночастиц (голубой), в присутствии неокисленного графена G (зелёный), в присутствии оксида графена (красный) / Solvent-accessible surface area (SASA) of Dps protein (A), DNA (B). Free energy of solvation of Dps protein (B), DNA (Г). The colors of the curves correspond to the solution composition: without the presence of graphene nanoparticles (blue), in the presence of unoxidized graphene G (green), in the presence of graphene oxide (red).

*Источник:* составлено авторами

(весь белок Dps содержит 2004 аминокислотных остатка). Влияние G на ДНК определяется тем, что частицы встраиваются между нуклеотидами ДНК и нарушают её структуру, что ведёт к уменьшению по модулю значения свободной энергии сольватации ДНК. Что касается  $\Delta G_{\text{solv}}$  белка Dps, то он практически не меняется в присутствии G и GO.

Структура образовавшихся в результате расчёта 100 нс траектории Dps с ДНК в присутствии высокой концентрации частиц неокисленного и окисленного графена выявляет разницу в возможностях связывания ДНК белком, модулируемую частицами графена (рис. 4). Графен и его оксид легко связывается



**Рис. 4 / Fig. 4.** Структура комплексов Dps-ДНК в присутствии частиц неокисленного графена G (А) и оксида графена GO (Б). Цветом обозначено: белок Dps (голубой), N-концевые участки белка Dps, 25 аминокислотных остатков (розовый), молекула ДНК (красный), частицы G (чёрный), частицы GO (чёрный с красными атомами кислорода) / Structure of Dps-DNA complexes in the presence of unoxidized graphene G (A) and graphene oxide GO (B) particles. Colors indicate: Dps protein (blue), N-terminal regions of the Dps protein (pink), DNA molecule (red), G (black), GO (black with red oxygen atoms).

*Источник:* составлено авторами

с подвижными N-концами белка Dps, которые отвечают за связывание с ДНК, изменяя их подвижность и возможность связаться с ДНК. Частицы неокисленного графена (рис. 4А) встраиваются в большую бороздку ДНК, нарушая структуру и геометрию молекулы. На поверхности ДНК сайтами связывания графена являются разрывы ДНК (в данном расчёте – концы олигонуклеотидов). На поверхности белка Dps основные сайты связывания частиц графена – N-концы. В образовавшемся комплексе Dps-ДНК молекула ДНК удерживается у белка N-концевыми участками белка и опосредованно кластерами графена. Частицы графена удерживаются в кластерах, представляющих собой одиночные стопки или несколько ортогональных относительно друг друга стопок. Что касается оксида графена (рис. 4Б), то его распределение на поверхности белка гораздо более равномерно и не ограничивается N-концами. То же касается и ДНК. Частицы GO не нарушают структуру ДНК, но способны встраиваться в малую бороздку ДНК, конкурируя с N-концами белка. В образовавшемся комплексе ДНК не связалась непосредственно с белком, но посредством частиц оксида графена. В кластерах GO частицы расположены как стопками друг над другом, так и под другими углами, не перпендикулярно относительно друг к другу.

### Заключение

Исследование динамики гексагональных графеновых наночастиц, в состав которых входит разное количество кислородсодержащих групп в растворе показало, что графеновые частицы в растворе, имитирующем цитоплазму грамотрицательной бактериальной клетки, образуют кластеры.

Частицы неокисленного графена преимущественно располагаются внутри кластеров и удерживаются с ближайшими частицами с помощью стекинг-взаимодействий. Частицы окисленного графена удерживаются друг с другом также водородными связями.

Расчёты динамики ДНК и Dps в присутствии 100 частиц оксида графена или неокисленного графена показали, что оба типа частиц оказывают влияние на процессы образования комплексов Dps-ДНК. Частицы неокисленного графена нарушают структуру ДНК путём интеркаляции и связывания с нуклеотидами. На поверхности белка G локализуется в области N-концов белка, GO – распределяется по всей поверхности белка. В бактериальной клетке связывание ДНК с белком определяется взаимодействием положительно заряженных аминокислотных остатков N-концов с малой бороздкой ДНК. Частицы оксида графена конкурируют за малую бороздку с N-концами белка. Они связываются с малой бороздкой ДНК и способствуют образованию комплекса ДНК и Dps в отсутствие прямого контакта биомолекул.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Моделирование атомных конфигураций нанокристаллов на стадии зародышеобразования / Н. Д. Жуков, А. А. Клецов, Д. С. Мосияш, В. В. Беляев // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 2. С. 6–18. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-2-6-18.
2. Nanomaterials in biology and medicine: a new perspective on its toxicity and applications / J. Saravanan, A. Nair, S. S. Krishna, V. Viswanad // Drug and Chemical Toxicology. 2024. Vol. 47. Iss. 5. P. 767–784. DOI: 10.1080/01480545.2024.2340002.
3. Wang E. C., Wang A. Z. Nanoparticles and their applications in cell and molecular biology // Integrative Biology. 2014. Vol. 6. Iss. 1. P. 9–26. DOI: 10.1039/c3ib40165k.
4. Metal-Based Nanoparticles: Antibacterial Mechanisms and Biomedical Application / D. Franco, G. Calabrese, S. P. P. Guglielmino, S. Conoci // Microorganisms. 2022. Vol. 10. No. 9. Article 1778. DOI: 10.3390/microorganisms10091778.
5. Carbon nanomaterials against pathogens; the antimicrobial activity of carbon nanotubes, graphene/graphene oxide, fullerenes, and their nanocomposites / M. Azizi-Lalabadi, H. Hashemi, J. Feng, S. M. Jafari // Advances in Colloid and Interface Science. 2020. Vol. 284. Article 102250. DOI: 10.1016/j.cis.2020.102250.
6. Вековищев М. П., Кирсанов Е. А. Вязкоупругость углеродных нанотрубок в полимерной матрице // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 1. С. 6–19. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-6-19.
7. Чаусов Д. Н., Смирнов Н. Н. Моделирование поверхности углеродной нанотрубки // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика – Математика. 2011. № 3. С. 97–101.
8. Терешкин Э. В., Терешкина К. Б., Крупянский Ю. Ф. Молекулярно-динамические расчёты адсорбции и подвижности биомолекул на поверхности графеновых подложек // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2023. № 4. С. 49–63. DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-49-63.
9. Высикайло Ф. И. Аналитическое описание спектров излучения стоячих экситонов большого радиуса в кристаллах IV группы элементов, легированных бором // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика – Математика. 2013. № 3. С. 36–45.
10. Mechanisms of action of the antibiotic ciprofloxacin on the DNA-binding protein Dps detected by molecular modeling techniques / K. B. Tereshkina, E. V. Tereshkin, V. V. Kovalenko, Yu. F. Krupyanski, N. G. Loiko // Mendeleev Communications. 2025. Vol. 35. Iss. 2. P. 148–151. DOI: 10.71267/mencom.7567.
11. Особенности связывания ДНК с двумерными кристаллами бактериального белка DPS Escherichia coli на основе данных молекулярной динамики / Э. В. Терешкин, К. Б. Терешкина, Н. Г. Лойко, В. В. Коваленко, Ю. Ф. Крупянский // Химическая физика. 2024. Т. 43. № 12. С. 84–94. DOI: 10.31857/S0207401X24120086.
12. The Dps Protein Protects Escherichia coli DNA in the Form of the Trimer / V. Kovalenko, K. Tereshkina, A. Moiseenko, Y. L. Ryzhykau, A. I. Kuklin, E. Tereshkin, P. Zaytsev, A. Generalova, N. Persiyantseva, O. S. Sokolova, Y. Krupyanski and N. Loiko //

- International Journal of Molecular Sciences. 2025. Vol. 26. Iss. 2. Article 619. DOI: 10.3390/ijms26020619.
13. Floating gate memory with charge storage dots array formed by Dps protein modified with site-specific binding peptides / H. Kamitake, M. Uenuma, N. Okamoto, M. Horita, Y. Ishikawa, I. Yamashita, Y. Uraoka // *Nanotechnology*. 2015. Vol. 26. Iss. 19. Article 195201. DOI: 10.1088/0957-4484/26/19/195201.
  14. Yamashita I. Biological path for functional nanostructure fabrication and nanodevices // *Surface Innovations*. 2016. Vol. 4. Iss. 3. P. 111–120. DOI: 10.1680/jsuin.16.00015.
  15. Bacterioferritin nanocage: Structure, biological function, catalytic mechanism, self-assembly and potential applications / M. Guo, M. Gao, J. Liu, N. Xu, H. Wang // *Biotechnology Advances*. 2022. Vol. 61. Article 108057. DOI: 10.1016/j.biotechadv.2022.108057.
  16. NMR-based structural modeling of graphite oxide using multidimensional <sup>13</sup>C solid-state NMR and ab initio chemical shift calculations / L. B. Casabianca, M. A. Shaibat, W. W. Cai, S. Park, R. Piner, R. S. Ruoff, Y. Ishii // *Journal of the American Chemical Society*. 2010. Vol. 132. Iss. 16. P. 5672–5676. DOI: 10.1021/ja9030243.
  17. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers / M. J. Abraham, T. Murtola, R. Schulz, S. Páll, J. C. Smith, B. Hess, E. Lindahl // *SoftwareX*. 2015. Vol. 1-2. P. 19–25. DOI: 10.1016/j.softx.2015.06.001.
  18. Intracellular ion concentrations and cation-dependent remodelling of bacterial MreB assemblies / D. Szatmári, P. Sárkány, B. Kocsis, T. Nagy, A. Miseta, S. Barkó, B. Longauer, R. C. Robinson, M. Nyitrai // *Scientific Reports*. 2020. Vol. 10. Article 12002. DOI: 10.1038/s41598-020-68960-w.
  19. Sorin E. J., Pande V. S. Exploring the helix-coil transition via all-atom equilibrium ensemble simulations // *Biophysical Journal*. 2005. Vol. 88. Iss. 4. P. 2472–2493. DOI: 10.1529/biophysj.104.051938.
  20. PARMBSC1: A refined force field for DNA simulations / I. Ivani, P. D. Dans, A. Noy, A. Pérez, I. Faustino, A. Hospital, J. Walther, P. Andrio, R. Goñi, A. Balaceanu, G. Portella et al. // *Nature Methods*. 2016. Vol. 13. Iss. 1. P. 55–58. DOI: 10.1038/nmeth.3658.
  21. Spackman M. A. Potential derived charges using a geodesic point selection scheme // *Journal of Computational Chemistry*. 1996. Vol. 17. Iss. 1. P. 1–18. DOI: 10.1002/(SICI)1096-987X(19960115)17:1<1::AID-JCC1>3.0.CO;2-V.
  22. Automatic atom type and bond type perception in molecular mechanical calculations / J. Wang, W. Wang, P. A. Kollman, D. A. Case et al. // *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. 2006. Vol. 25. Iss. 2. P. 247–260. DOI: 10.1016/j.jmkgm.2005.12.005.
  23. A fast and high-quality charge model for the next generation general AMBER force field / X. He, V. H. Man, W. Yang, T. S. Lee, J. Wang // *Journal of Chemical Physics*. 2020. Vol. 153. Iss. 11. Article 114502. DOI: 10.1063/5.0019056.
  24. The double cubic lattice method: Efficient approaches to numerical integration of surface area and volume and to dot surface contouring of molecular assemblies / F. Eisenhaber, P. Lijnzaad, P. Argos, C. Sander, M. Scharf // *Journal of computational chemistry*. 1995. Vol. 16. Iss. 3. P. 273–284. DOI: 10.1002/jcc.540160303.

## REFERENCES

1. Zhukov, N. D., Kletsov, A. A., Mosiyash, D. S. & Belyaev, V. V. (2024). Modelling of nanocrystals atomic configurations at nuclei formation. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2, 6–18. DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-6-18 (in Russ.).
2. Saravanan, J., Nair, A., Krishna, S. S. & Viswanad, V. (2024). Nanomaterials in biology and medicine: a new perspective on its toxicity and applications. In: *Drug and Chemical Toxicology*, 47 (5), 767–784. DOI: 10.1080/01480545.2024.2340002.
3. Wang, E. C. & Wang, A. Z. (2014). Nanoparticles and their applications in cell and molecular biology. In: *Integrative Biology*, 6 (1), 9–26. DOI: 10.1039/c3ib40165k.
4. Franco, D., Calabrese, G. Guglielmino, S. P. P. & Conoci, S. (2022). Metal-Based Nanoparticles: Antibacterial Mechanisms and Biomedical Application. In: *Microorganisms*, 10 (9), 1778. DOI: 10.3390/microorganisms10091778.
5. Azizi-Lalabadi, M., Hashemi, H., Feng, J. & Jafari, S. M. (2020). Carbon nanomaterials against pathogens; the antimicrobial activity of carbon nanotubes, graphene/graphene oxide, fullerenes, and their nanocomposites. In: *Advances in Colloid and Interface Science*, 284, 102250. DOI: 10.1016/j.cis.2020.102250.
6. Vekovishchev, M. P. & Kirsanov, E. A. (2024). Viscoelasticity of carbon nanotubes in a polymer matrix. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 1, 6–19. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-6-19 (in Russ.).
7. Chausov, D. N. & Smirnov, N. N. (2011). Simulation of carbon nanotube surface. In: *Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2011, 3, 97–101 (in Russ.).
8. Tereshkin, E. V., Tereshkina, K. B. & Krupyanskii, Yu. F. (2023). Molecular dynamic of the adsorption and mobility of biomolecules on graphene sheets. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 4, 49–63. DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-49-63 (in Russ.).
9. Vysikaylo, Ph. I. (2013). Analytical description of the emission spectra of standing large-radius excitons in crystals of group IV elements, boron-doped. In: *Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 3, 36–44 (in Russ.).
10. Tereshkina, K. B., Tereshkin, E. V., Kovalenko, V. V., Krupyanskii, Yu. F. & N. G. Loiko (2025). Mechanisms of action of the antibiotic ciprofloxacin on the DNA-binding protein Dps detected by molecular modeling techniques. In: *Mendeleev Communications*, 35 (2), 148–151. DOI: 10.71267/mencom.7567.
11. Tereshkin, E. V., Tereshkina, K. B., Loiko, N. G., Kovalenko, V. V. & Krupyanskii, Y. F. (2024). Peculiarities of DNA binding to two-dimensional crystals of bacterial protein DPS from escherichia coli based on molecular dynamics data. In: *Advances in Chemical Physics*, 43 (12), 84–94 DOI: 10.31857/S0207401X24120086 (in Russ.).
12. Kovalenko, V., Tereshkina, K., Moiseenko, A., Ryzhykau, Y. L., Kuklin, A. I., Tereshkin, E., Zaytsev, P., Generalova, A., Persiyantseva, N., Sokolova, O.S., Krupyanskii, Y. & Loiko N. (2025). The Dps protein protects Escherichia coli DNA in the

- form of the trimer. In: *International Journal of Molecular Science*, 26 (2), 619. DOI: 10.3390/ijms26020619.
13. Kamitake, H., Uenuma, M., Okamoto, N., Horita, M., Ishikawa Y, Yamashita I. & Uraoka, Y. (2015). Floating gate memory with charge storage dots array formed by Dps protein modified with site-specific binding peptides. In: *Nanotechnology*, 26 (19), 195201. DOI: 10.1088/0957-4484/26/19/195201.
  14. Yamashita, I. (2016). Biological path for functional nanostructure fabrication and nanodevices. In: *Surface Innovations*, 4 (3), 111–120. DOI: 10.1680/jsuin.16.00015.
  15. Guo, M., Gao, M., Liu, J., Xu, N. & Wang, H. (2022). Bacterioferritin nanocage: Structure, biological function, catalytic mechanism, self-assembly and potential applications. In: *Biotechnology Advances*, 61, 108057. DOI: 10.1016/j.biotechadv.2022.108057.
  16. Casabianca, L. B., Shaibat, M. A., Cai, W. W., Park, S., Piner, R., Ruoff, R. S. & Ishii, Y. (2010). NMR-based structural modeling of graphite oxide using multidimensional <sup>13</sup>C solid-state NMR and ab initio chemical shift calculations. In: *Journal of the American Chemical Society*, 132 (16), 5672–5676. DOI: 10.1021/ja9030243.
  17. Abraham, M. J., Murtola, T., Schulz, R., Páll, S., Smith, J. C., Hess, B. & Lindahl, E. (2015). GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers. In: *SoftwareX*, 1-2, 19–25.
  18. Szatmári, D., Sárkány, P., Kocsis, B., Nagy, T., Miseta, A., Barkó, S., Longauer, B. R., Robinson, C. & Nyitrai, M. (2020). Intracellular ion concentrations and cation-dependent remodelling of bacterial MreB assemblies. In: *Scientific Reports*, 10, 12002. DOI: 10.1038/s41598-020-68960-w.
  19. Sorin, E. J. & Pande, V. S. (2005). Exploring the helix-coil transition via all-atom equilibrium ensemble simulations. In: *Biophysical Journal*, 88 (4), 2472–2493. DOI: 10.1529/biophysj.104.051938.
  20. Ivani, I., Dans, P. D., Noy, A., Pérez, A., Faustino, I., Hospital, A., Walther, J., Andrio, P., Goñi, R., Balaceanu, A., Portella, G. & et al. (2016). PARMBSC1: A refined force field for DNA simulations. In: *Nature Methods*, 13 (1), 55–58. DOI: 10.1038/nmeth.3658.
  21. Spackman, M. A. (1996). Potential derived charges using a geodesic point selection scheme. In: *Journal of Computational Chemistry*, 1996. Vol. 17. P. 1-18. DOI: 10.1002/(SICI)1096-987X(19960115)17:1<1::AID-JCC1>3.0.CO;2-V.
  22. Wang, J., Wang, W., Kollman, P. A., Case, D. A. & et al. (2006). Automatic atom type and bond type perception in molecular mechanical calculations. In: *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 25 (2), 247–260. DOI: 10.1016/j.jmgm.2005.12.005
  23. He, X., Man, V. H., Yang, W., Lee T. S. & Wang, J. (2020). A fast and high-quality charge model for the next generation general AMBER force field. In: *Journal of Chemical Physics*, 153 (11), 114502. DOI: 10.1063/5.0019056.
  24. Eisenhaber, F., Lijnzaad, P., Argos, P., Sander, C., & Scharf, M. (1995). The double cubic lattice method: Efficient approaches to numerical integration of surface area and volume and to dot surface contouring of molecular assemblies. In: *Journal of computational chemistry*, 16 (3), 273–284. DOI: 10.1002/jcc.540160303

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

*Терешкин Эдуард Владимирович* (г. Москва) – научный сотрудник отдела строения вещества Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук;  
<https://orcid.org/0000-0001-6091-7476>, e-mail: ramm@mail.ru

*Терешкина Ксения Борисовна* (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела строения вещества Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук;  
<https://orcid.org/0000-0003-1165-5224>, e-mail: ksenia.tereshkina@chph.ras.ru

*Крупянский Юрий Федорович* (г. Москва) – доктор физико-математических наук, заведующий отделом строения вещества Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук;  
<https://orcid.org/0000-0002-2994-4799>, e-mail: yuriifkru@gmail.com

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Eduard V. Tereshkin* (Moscow) – Researcher, Department of Structure of Matter, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;  
<https://orcid.org/0000-0001-6091-7476>, e-mail: ramm@mail.ru

*Ksenia B. Tereshkina* (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Department of Structure of Matter, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;  
<https://orcid.org/0000-0003-1165-5224>, e-mail: ksenia.tereshkina@chph.ras.ru

*Yurii F. Krupyanskii* (Moscow) – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Departmental Head, Department of Structure of Matter, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;  
<https://orcid.org/0000-0002-2994-4799>, e-mail: yuriifkru@gmail.com

Научная статья

УДК 533.6.011.8

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-4-150

## МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ ЛОКАЛЬНОЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ ПО СКОРОСТЯМ

Тимохин М. Ю.<sup>1,2,\*</sup>, Бондарь Е. А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация

<sup>2</sup> Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, Российская Федерация

\*Корреспондирующий автор, e-mail: timokhin@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 22.10.2025

Принята к публикации 31.10.2025

### Аннотация

**Цель.** Исследование применимости классических макроскопических приближений для получения неравновесной локальной функции распределения внутри структуры сильной ударной волны.

**Процедура и методы.** В настоящей работе рассматриваются возможности аппроксимации неравновесной молекулярной функции распределения с помощью различных макроскопических моделей (уравнения Навье – Стокса – Фурье, уравнения Барнетта, оригинальные и регуляризированные 13-моментные уравнения Грэда).

**Результаты.** Результаты восстановления локальной функции распределения по макропараметрам течения для рассматриваемых моделей сравниваются друг с другом и с эталонным решением в различных точках структуры плоской ударной волны. В качестве эталонного решения используется метод прямого статистического моделирования (ПСМ) Монте-Карло, который обеспечивает макропараметры потока, необходимые для восстановления функции распределения.

**Теоретическая значимость.** Сделаны выводы, что все рассмотренные классические модели довольно плохо предсказывают функцию распределения в сверхзвуковой части структуры ударной волны, где наблюдаются сильные осцилляции и нефизичные отрицательные значения.

**Ключевые слова:** метод Чепмена – Энскога; метод ПСМ; моментный метод Грэда; неравновесность; динамика разреженного газа; ударная волна; функция распределения молекул

**Благодарности и источники финансирования.** Численные исследования на основе ПСМ выполнены в рамках государственного задания ИТПМ СО РАН (номер государственной регистрации: 124021400040-4). Получение и анализ континуальных приближений выполнены при поддержке гранта РФФИ № 22-71-10045-П.

**Для цитирования:**

Тимохин М. Ю., Бондарь Е. А. Макроскопические газодинамические приближения локальной неравновесной функции распределения молекул по скоростям // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 4. С. 59–76. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-150>

**Original research article****MACROSCOPIC GAS-DYNAMIC APPROXIMATIONS OF THE LOCAL NONEQUILIBRIUM MOLECULAR VELOCITY DISTRIBUTION FUNCTION**

*M. Timokhin*<sup>1,2,\*</sup>, *Ye. Bondar*<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup> *Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

<sup>2</sup> *Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Science, Novosibirsk, Russian Federation*

\*Corresponding author, e-mail: [timokhin@physics.msu.ru](mailto:timokhin@physics.msu.ru)

*Received by the editorial office 22.10.2025*

*Accepted for publication 31.10.2025*

**Abstract**

**Aim.** The investigation into the applicability of classical macroscopic approximations to obtain the nonequilibrium local distribution function inside the structure of a strong shock wave.

**Methodology.** This paper examines the capability of various macroscopic models (the Navier – Stokes – Fourier equations, the Burnett equations, and the original and regularized 13-moment Grad equations) to approximate a nonequilibrium molecular velocity distribution function.

**Results.** The locally reconstructed distribution functions obtained from the flow macro-parameters for the considered models are compared with each other and with a benchmark solution at different locations within the structure of a planar shock wave. The benchmark solution is provided by the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method, which supplies the flow macro-parameters required for the reconstruction of the distribution function.

**Research implications.** All considered models predict the distribution function rather poorly in the supersonic part of the shock-wave structure, where strong oscillations and nonphysical negative values are observed.

**Keywords:** Chapman-Enskog method; DSMC method; Grad moment method; kinetic theory of gases; rarefied gas dynamics; shock wave; velocity distribution function.

**Acknowledgments.** Numerical studies based on the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method were carried out within the framework of the state assignment of the Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of the RAS (state registration number: 124021400040-4). The development and analysis of continuum approximations were supported by the Russian Science Foundation Grant No. 22-71-10045-P.

**For citation:**

Timokhin, M. Yu. & Bondar, Ye. A. (2025). Macroscopic Gas-Dynamic Approximations of the Local Nonequilibrium Molecular Velocity Distribution Function. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 4, pp. 59–76. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-150>.

## Введение

Кинетическое уравнение Больцмана является центральной математической моделью динамики разреженных газов и кинетической теории газов [1]. Разреженные течения идеального газа могут быть с высокой точностью смоделированы либо путём непосредственного решения уравнения Больцмана [2; 3], либо методом прямого статистического моделирования Монте-Карло (PCM, DSMC) [4; 5]. Обычно такой подход к численному моделированию газовых течений называют «кинетическим». Искомым решением уравнения является функция распределения молекул в фазовом пространстве. Все локальные макропараметры течения газа в данной точке могут быть получены как моменты функции распределения путём усреднения молекулярных характеристик (функций скорости) по пространству скоростей.

Когда локальная средняя длина свободного пробега молекул мала по сравнению с характерным масштабом задачи, кинетический подход становится вычислительно затратным [6]. С другой стороны, для таких течений отклонение от равновесия можно считать малым. Для подобных близких к континуальному режимов может быть применён «континуальный» подход, основанный на различных макроскопических моделях газовой динамики, требующий существенно меньших вычислительных ресурсов по сравнению с кинетическим подходом [7; 8]. Эти модели описывают течение конечным числом макропараметров и строятся так, чтобы аппроксимировать решение уравнения Больцмана в условиях близости к равновесию [7; 9].

Для вывода макроскопических моделей используются различные методы. Метод Чепмена – Энскога позволяет получить уравнения Эйлера, Навье – Стокса – Фурье (НСФ, NSF), Барнетта и супер-Барнетта непосредственно из кинетического уравнения Больцмана [1; 7; 9; 10]. Различные системы моментных уравнений могут быть получены с помощью разложения функции распределения по полиномам Эрмита методом Грэда [11] с возможной последующей регуляризацией (например, [7]). Эти макроскопические модели обеспечивают удовлетворительное согласие с решениями уравнения Больцмана в ряде задач динамики разреженных газов, особенно для близких к континуальному режимов, с точки зрения пространственных распределений макропараметров (см., например, [12–17]).

Важно отметить, что упомянутые выше модели основаны на определённых предположениях о том, как локальная неравновесная функция распределения по скоростям зависит от локальных макропараметров и, в некоторых случаях, от их градиентов. Это означает, что для каждой модели можно восстановить функцию распределения по известным полям соответствующих макропараметров. Представляет существенный интерес сравнить аппроксимации неравновесной функции распределения, задаваемые макроскопическими моделями, с решением уравнения Больцмана.

Цель настоящей работы – выполнить такое сравнение для иерархии макроскопических моделей в условиях заметного теплового неравновесия.

Реконструкции функций распределения по скоростям выполняются по полям макропараметров, полученным методом ПСМ, а функция распределения, вычисленная методом ПСМ, рассматривается как эталонное решение уравнения Больцмана.

Для анализа качества получаемых приближений используется классическая задача о структуре плоской ударной волны. В работе исследуются аппроксимации функции распределения по скоростям, соответствующие уравнениям Эйлера, НСФ, Барнетта, исходной 13-моментной системе Грэда (G13) и регуляризированной 13-моментной системе (R13).

### Аппроксимации функции распределения молекул по скоростям

Метод Чепмена – Энскога позволяет вывести уравнения Эйлера, НСФ и Барнетта непосредственно из кинетического уравнения Больцмана [7; 9]. Равновесная максвелловская функция распределения молекул по скоростям  $f_M$  принимается в качестве нулевого приближения; поэтому уравнения Эйлера, получаемые при максвелловской фазовой плотности, имеют нулевой порядок ( $Kn^0$ ). Следующий шаг ( $Kn^1$ ) соответствует уравнениям Навье – Стокса – Фурье первого порядка с фазовой плотностью

$$f_{\text{NSF}} = f_M \left[ 1 + \frac{\sigma_{ij}^{\text{NSF}}}{2p\theta} C_{<i} C_{j>} + \frac{2}{5} \frac{q_k^{\text{NSF}}}{p\theta} C_k \left( \frac{C^2}{2\theta} - \frac{5}{2} \right) \right], \quad (1.1)$$

где  $\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{v}$  – тепловая молекулярная скорость,  $p$  – давление,  $\theta = \frac{k}{m} T$  –

температура в энергетических единицах,  $k$  – постоянная Больцмана,  $m$  – масса молекулы, а  $T$  – температура газа в кельвинах. Угловые скобки в индексах означают безследовую симметричную часть тензора. Компоненты тензора напряжений  $\sigma_{ij}^{\text{NSF}}$  и теплового потока  $q_i^{\text{NSF}}$  в модели НСФ вычисляются соответственно по градиентам скорости и температуры:

$$\sigma_{ij}^{\text{NSF}} = -2\mu \frac{\partial v_i}{\partial x_j}, \quad q_i^{\text{NSF}} = -\frac{15}{4} \mu \frac{\partial \theta}{\partial x_i}, \quad (1.2)$$

где  $\mu$  – локальная вязкость.

Приближение Барнетта имеет второй порядок ( $Kn^2$ ). В настоящей работе рассматривается «ограниченная» функция распределения Барнетта  $f_{\text{Burnett}}$  [10; 17], в которой учитываются вклады Барнетта только в компоненты теплового потока и тензора напряжений. Таким образом,  $f_{\text{Burnett}}$  в данном исследовании совпадает с  $f_{\text{NSF}}$ , заданной формулой (1.1), если заменить  $\sigma_{ij}^{\text{NSF}}$  на  $\sigma_{ij}^{\text{Burnett}}$ , а  $q_i^{\text{NSF}}$  – на  $q_i^{\text{Burnett}}$ . Компоненты тензора напряжений и теплового потока Барнетта можно представить следующим образом (см., например, [7; 9]):

$$\sigma_{ij}^{\text{Burnett}} = \sigma_{ij}^{\text{NSF}} + \frac{\mu^2}{p} \left[ K_1 \frac{\partial v_k}{\partial x_k} A_{ij} + K_2 \left( \frac{\partial}{\partial x_{\langle i}} \left( \frac{F_{j\rangle}}{m} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_{j\rangle}} \right) - \frac{\partial v_k}{\partial x_{\langle i}} \frac{\partial v_{j\rangle}}{\partial x_k} - 2 \frac{\partial v_k}{\partial x_{\langle i}} A_{j\rangle k} \right) \right. \\ \left. + K_3 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_{\langle i} \partial x_{j\rangle}} + K_4 \frac{1}{p} \frac{\partial \theta}{\partial x_{\langle i}} \frac{\partial p}{\partial x_{j\rangle}} + K_5 \frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial x_{\langle i}} \frac{\partial \theta}{\partial x_{j\rangle}} + K_6 A_{k\langle i} A_{j\rangle k} \right], \quad (1.3)$$

$$q_i^{\text{Burnett}} = q_i^{\text{NSF}} + \frac{\mu^2}{\rho} \left[ B_1 \frac{1}{\theta} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} + B_2 \left( \frac{2}{3} \frac{\partial^2 v_k}{\partial x_k \partial x_i} + \frac{2}{3\theta} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} + \frac{2}{\theta} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} \right) \right. \\ \left. + B_3 \frac{A_{ik}}{p} \frac{\partial p}{\partial x_k} + B_4 \frac{\partial A_{ik}}{\partial x_k} \frac{\partial p}{\partial x_j} + B_5 A_{ik} \frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} \right], \quad (1.4)$$

где  $F_i$  – компоненты вектора внешней силы. Значения коэффициентов  $K_i$  и  $B_i$  зависят от закона межмолекулярного взаимодействия. Здесь они взяты для максвелловских молекул (см. [9]).

Метод Грэда позволяет получить 13- и 26-моментные системы уравнений с использованием разложения по полиномам Эрмита [7; 9]. 13-моментная функция распределения Грэда (G13), подобно функции распределения Барнетта, приводит к уравнениям второго порядка ( $Kn^2$ ). Функция распределения G13  $f_{\text{G13}}$  аналогична  $f_{\text{NSF}}$ , заданной формулой (1.1), но величины  $\sigma_{ij}^{\text{NSF}}$  и  $q_i^{\text{NSF}}$  заменяются значениями тензора напряжений и теплового потока, полученными из точного решения уравнения Больцмана, представленного фазовой плотностью  $f$ :

$$\sigma_{ij} = m \int \left( C_i C_j - \frac{1}{3} C^2 \delta_{ij} \right) f \, d\mathbf{c}, \quad q_i = \frac{m}{2} \int C^2 c_i f \, d\mathbf{c}. \quad (1.5)$$

Регуляризованная система R13 [7] вместе с соответствующей функцией распределения является примером приближения третьего порядка. Функция распределения R13 может быть записана следующим образом [7]:

$$f_{\text{R13}} = f_M \left[ 1 + \frac{\sigma_{ij}}{2p\theta} C_{\langle i} C_{j\rangle} + \frac{2}{5} \frac{q_k}{p\theta} C_k \left( \frac{C^2}{2\theta} - \frac{5}{2} \right) \right. \\ \left. - \frac{R_{ij}}{4p\theta^2} C_{\langle i} C_{j\rangle} \left( 1 - \frac{1}{7} \frac{C^2}{\theta} \right) + \frac{m_{ijk}}{6\rho\theta^3} C_{\langle i} C_j C_{k\rangle} + \frac{\Delta}{8p\theta} \left( 1 - \frac{2}{3} \frac{C^2}{\theta} + \frac{1}{15} \frac{C^4}{\theta^2} \right) \right]. \quad (1.6)$$

Моменты более высокого порядка  $m_{ijk}$ ,  $R_{ij}$  и  $\Delta$  могут быть вычислены через первые 13 моментов (плотность, температура, тензор напряжений и тепловой поток). Существует несколько нелинейных вариантов уравнений R13, различающихся соотношениями для моментов более высокого порядка [7; 18]. В линейном варианте уравнений R13 (градиентный механизм переноса [19]), используемом в настоящем исследовании [20], моменты более высокого порядка имеют вид

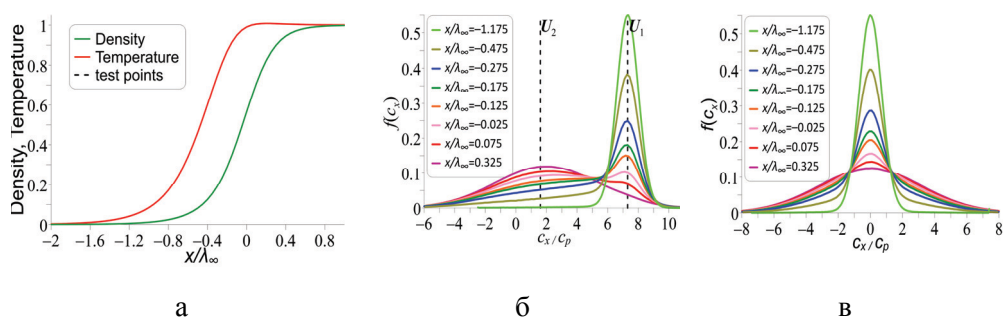
$$m_{ijk} = -2 \frac{\mu\theta}{p} \frac{\partial \sigma_{\langle ij\rangle}}{\partial x_k}, \quad R_{ij} = -\frac{24}{5} \frac{\mu\theta}{p} \frac{\partial q_{\langle i}}{\partial x_{j\rangle}}, \quad \Delta = -12 \frac{\mu\theta}{p} \frac{\partial q_i}{\partial x_i}. \quad (1.7)$$

## Результаты

Как уже отмечалось выше, метод ПСМ используется здесь для получения решения уравнения Больцмана (эталонной функции распределения молекулярных скоростей и различных макропараметров). Межмолекулярное взаимодействие моделируется в рамках модели переменных твёрдых сфер (Variable Hard Spheres, VHS) [4]. Шаг по времени в расчётах выбирался достаточно малым (меньше среднего времени между столкновениями), что обеспечивало высокую точность результатов. Настоящие вычисления выполнены с использованием двух различных ПСМ-кодов: SMILE и SMILE++ [21; 22]. Заметных различий между результатами не выявлено.

Одномерная структура плоской ударной волны в одноатомном газе является классической задачей динамики разреженных газов. Множество публикаций посвящено аналитическому (см., например, [23–25]), численному (см., например, [3; 7; 18; 26]) и экспериментальному (см., например, [27–30]) исследованию этой задачи.

Обычно рассматривают систему отсчёта, связанную с фронтом ударной волны. Тогда граничные условия задаются следующим образом:  $\rho_1$ ,  $u_1$  и  $\theta_1$  – значения плотности, скорости и температуры на входной границе (в набегающем потоке), а  $\rho_2$ ,  $u_2$  и  $\theta_2$  – соответствующие значения на выходной границе (за ударной волной), которые могут быть определены из соотношений Ранкина – Гюнио [31].



**Рис. 1 / Fig. 1.** Профили плотности и температуры в структуре плоской ударной волны (а), результаты ПСМ для функций распределения в различных точках для параллельной (б) и перпендикулярной (в) компонент молекулярной скорости / Density and temperature profiles in the structure of a plane shock wave (а), DSMC results for distribution functions at different points for parallel (б) and perpendicular (в) components of molecular velocity

Источник: составлено авторами

Рис. 1 (а) демонстрирует профили плотности и температуры, полученные методом ПСМ, для числа Маха  $Ma = 8.0$ . Пространственная координата

нормирована на длину свободного пробега в набегающем потоке. Плотность и температура нормированы следующим образом:

$$\hat{\rho} = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}, \quad \hat{\theta} = \frac{\theta - \theta_1}{\theta_2 - \theta_1}. \quad (1.8)$$

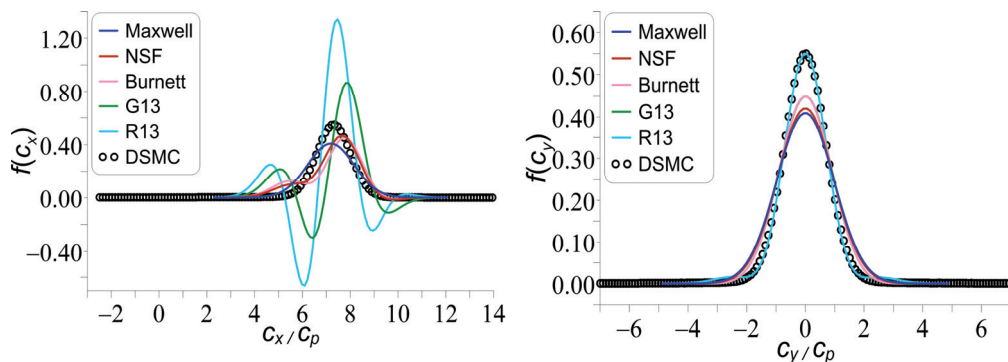
Начало координат помещено в точку, где нормированная плотность равна 0.5. Число Кнудсена для данной задачи нельзя определить однозначно из-за отсутствия явного характерного масштаба длины. Однако можно определить локальное число Кнудсена через градиенты макропараметров либо по отклонению неравновесных макропараметров от приближения НСФ [18; 32]. Структура ударной волны при  $Ma = 8.0$  является весьма экстремальным случаем для макроскопических моделей течения вследствие высокой степени неравновесности. В этом случае локальное число Кнудсена изменяется в широком диапазоне – от 0 до 0.5 – в различных областях течения [18].

Локальная функция распределения молекул была получена в расчётах ПСМ в различных точках структуры плоской ударной волны. Функции распределения для рассматриваемых макроскопических моделей были восстановлены в тех же точках с использованием данных ПСМ по макропараметрам. Примеры локальных функций распределения скоростей, полученных в расчётах ПСМ, представлены на рис. 1 (б, в). Функция распределения компоненты молекулярной скорости  $c_x$  в направлении  $x$  и безразмерная молекулярная скорость  $\hat{c}_x$  определяются следующим образом (определения для направлений  $y$  и  $z$  аналогичны):

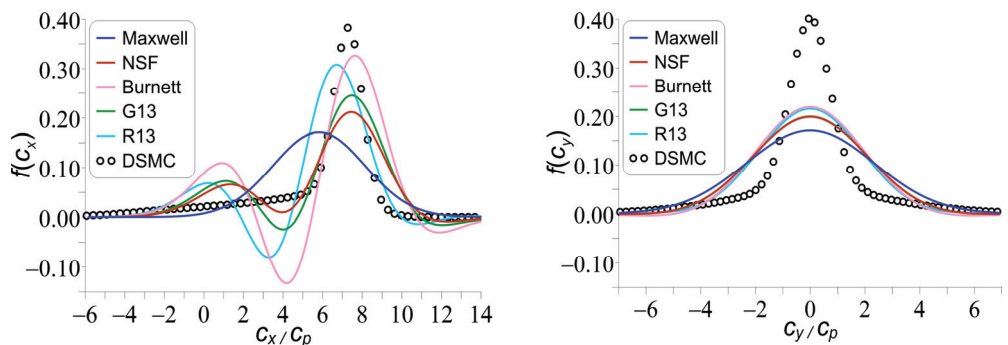
$$f(c_i) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(c_i, c_j, c_k) dc_j dc_k, \quad \hat{c}_i = \frac{c_i}{\sqrt{2\theta_1}}. \quad (1.9)$$

Функции распределения ПСМ внутри ударной волны имеют типичную бимодальную форму, обусловленную вкладом набегающего и уходящего максвеллианов, центрированных соответственно на скорости набегающего потока  $U_1$  и скорости потока за ударной волной  $U_2$ .

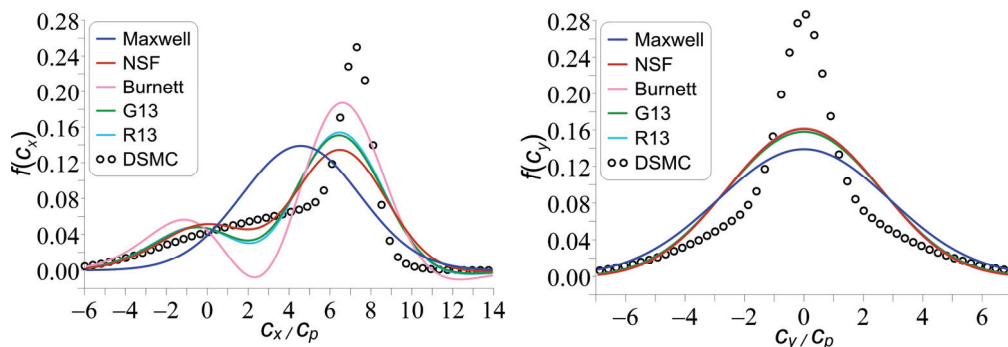
Функции распределения для различных макроскопических моделей были сопоставлены между собой и с результатами ПСМ. Примеры некоторых точек представлены на рис. 2-4. Первый ряд представляет результаты для  $f(c_x)$ , а второй – для  $f(c_y)$ . Наиболее трудной для описания макроскопическими методами областью структуры ударной волны является сверхзвуковая часть [13]. Как видно из рис. 2-4, уже в первой рассматриваемой точке ударной волны ( $x/\lambda_\infty = -1.175$ ,  $\hat{\rho} = 0.006$ ) локальная функция распределения начинает заметно отличаться от максвелловской. Появляется хвост распределения, формируемый медленными молекулами. Иными словами, начинает возрастать мода распределения, соответствующая равновесным значениям справа от ударной волны (см. рис. 1 (а)).



$$x/\lambda_\infty = -1.175, \hat{\rho} = 0.006$$



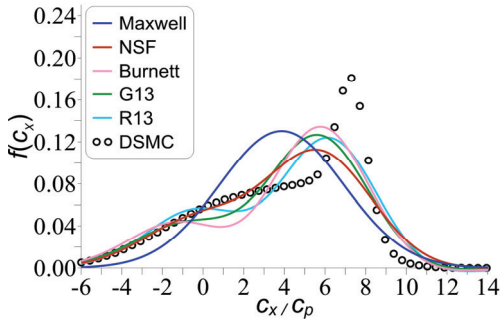
$$x/\lambda_\infty = -0.475, \hat{\rho} = 0.091$$



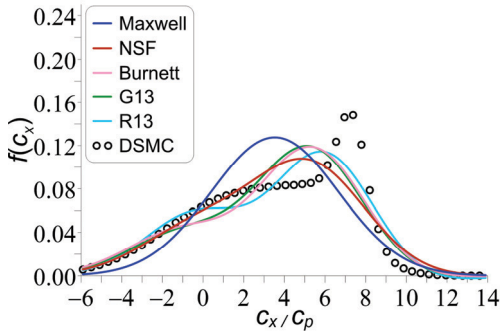
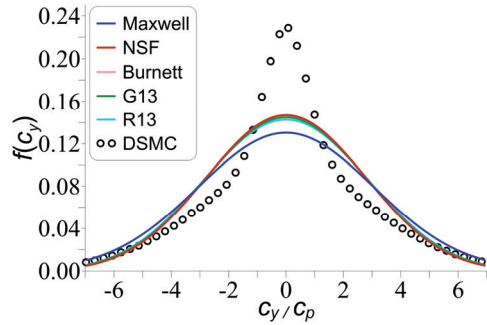
$$x/\lambda_\infty = -0.275, \hat{\rho} = 0.214$$

**Рис. 2 / Fig. 2.** Примеры сопоставления функций распределения для различных макроскопических моделей между собой и с результатами ПСМ / Examples of comparison of distribution functions for various macroscopic models with each other and with the results of the DSMC

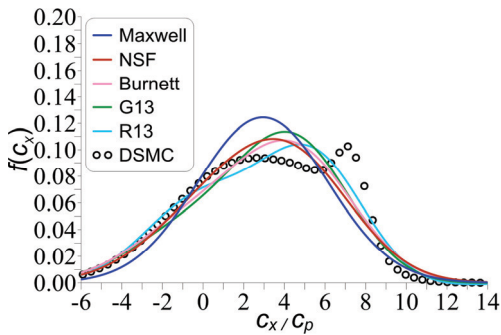
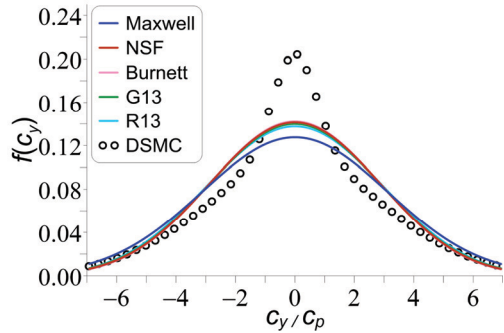
Источник: составлено авторами



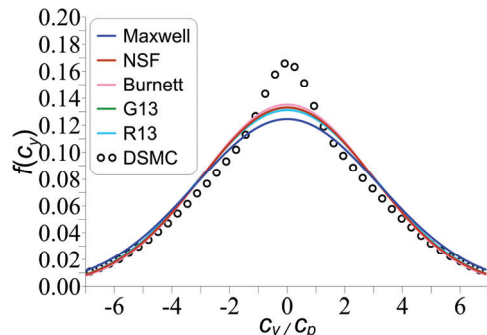
$$x / \lambda_{\infty} = -0.175, \hat{\rho} = 0.319$$



$$x / \lambda_{\infty} = -0.125, \hat{\rho} = 0.384$$

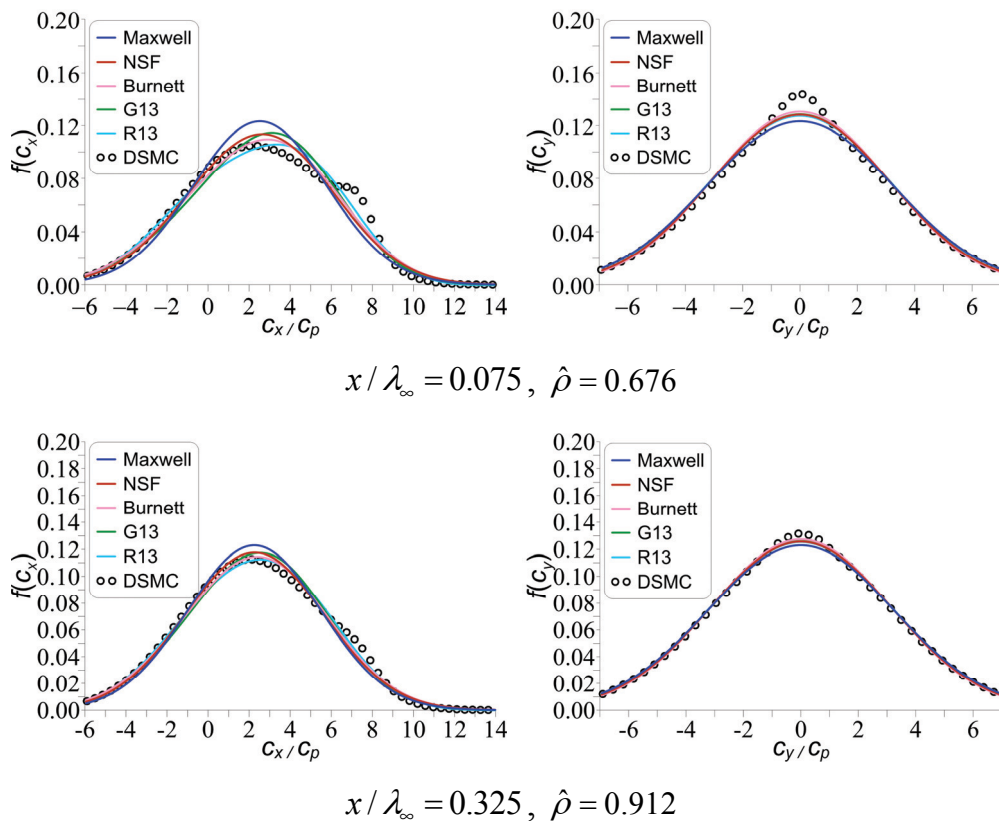


$$x / \lambda_{\infty} = -0.025, \hat{\rho} = 0.528$$



**Рис. 3 / Fig. 3.** Примеры сопоставления функций распределения для различных макроскопических моделей между собой и с результатами ПСМ / Examples of comparison of distribution functions for various macroscopic models with each other and with the results of the DSMC

*Источник: составлено авторами*



**Рис. 4 / Fig. 4.** Примеры сопоставления функций распределения для различных макроскопических моделей между собой и с результатами ПСМ / Examples of comparison of distribution functions for various macroscopic models with each other and with the results of the DSMC

*Источник: составлено авторами*

Функция распределения продольной компоненты скорости ( $x$ -скорости) в моделях G13 и R13 демонстрирует крайне сильные осцилляции и оказывается существенно отрицательной на некоторых скоростях. Хорошо известно, что даже распространённые макроскопические модели, такие как уравнения НСФ, могут давать нефизические отрицательные значения фазовой плотности [1; 7; 11; 33]. Здесь проявляется ограничение на распределение высокоскоростных молекул, обсуждаемое в работе [34]. В рассматриваемой иерархии в этом случае сходимость отсутствует. Для структуры ударной волны с числом Маха набегающего потока  $Ma = 8.0$ , рассматриваемой в настоящей работе, сходимость континуальных приближений наблюдается при локальном числе Маха  $Ma < 1.4$ . Результаты для всех остальных моделей по продольной молекулярной скорости значительно ближе к предсказаниям ПСМ.

Продвижение дальше вниз по течению (при уменьшении локального числа Маха) приводит к более выраженному хвосту распределения ПСМ в области малых скоростей. Для второй точки ( $x/\lambda_\infty = -0.475$ ,  $\hat{\rho} = 0.091$ ) модели G13 и R13 предсказывают распределения по продольной скорости, существенно более близкие к результатам ПСМ, чем в первой точке; при этом модель G13 уже не демонстрирует отрицательных значений. С другой стороны, приближения НСФ и Барнетта показывают значительно более сильные осцилляции, чем в первой точке; в случае Барнетта распределение достигает наибольших отрицательных значений среди всех моделей. В целом все макроскопические модели в данном исследовании дают качественно сходные распределения с двумя локальными максимумами и двумя локальными минимумами. Распределения по поперечной скорости для всех моделей в обеих точках выглядят более типично и напоминают гауссов «колокол».

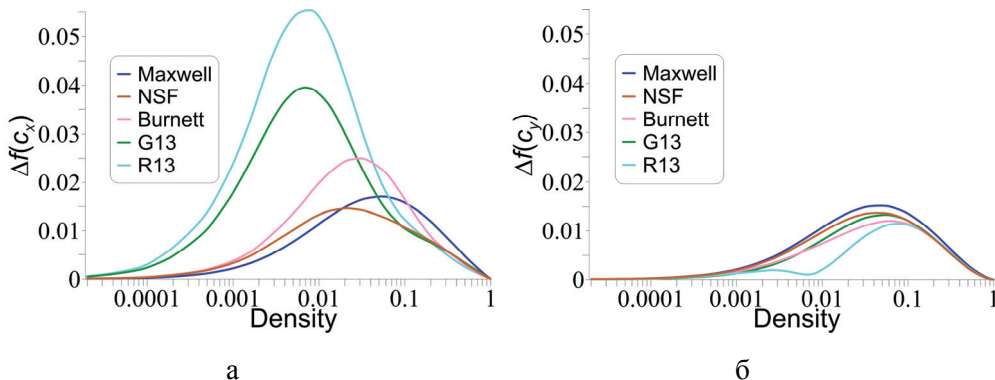
Распределения в третьей точке ( $x/\lambda_\infty = -0.275$ ,  $\hat{\rho} = 0.214$ ) качественно похожи, но менее экстремальны: интервалы отрицательных значений в распределении продольной молекулярной скорости появляются лишь в модели Барнетта. Далее в трёх следующих точках (в координатах  $x/\lambda_\infty = -0.175$ ,  $x/\lambda_\infty = -0.125$  и  $x/\lambda_\infty = -0.025$ ) мода малых скоростей начинает оформляться, и распределение ПСМ для продольной компоненты молекулярной скорости приобретает отчётливо бимодальный характер. Все распределения макроскопических моделей становятся значительно менее осциллирующими, имеют лишь один максимум и не содержат отрицательных участков. Примеры двух последних точек ( $x/\lambda_\infty = 0.075$  и  $x/\lambda_\infty = 0.325$ ), расположенные ниже по течению относительно центра ударной волны, распределения ПСМ близки к равновесным и имеют лишь небольшой «бугорок» как в продольном, так и в поперечном распределении скорости, напоминающий вклад высокоскоростного максвеллиана. В этой точке распределения всех макроскопических моделей практически совпадают друг с другом.

Можно заключить, что все рассмотренные макроскопические модели довольно плохо предсказывают функцию распределения по скоростям в области малого значения плотности на ведущем фронте ударной волны. Для количественной оценки этого расхождения была вычислена интегральная ошибка всех приближений функции распределения для каждой из компонент:

$$\Delta f(c_i) = \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} (f(c_i) - f_{\text{DSMC}}(c_i))^2 dc_i \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.10)$$

Зависимость этой величины от локальной нормированной плотности приведена на рис. 5. Отметим, что данное определение ошибки не является инвариантным относительно поворотов, поскольку сравниваемые фазовые плотности  $f$  и  $f_{\text{DSMC}}$  – это интегралы, заданные формулой (1.9), а значит, они зависят от выбора системы отсчёта. Более того, сами уравнения Барнетта не инвариантны относительно поворотов [1; 7]. Поэтому приведённые данные по ошибке следует рассматривать лишь в качестве качественной характеристики

макроскопических моделей. В то же время, значительно большие значения ошибок для аппроксимаций продольной компоненты молекулярной скорости, нежели поперечной, объясняется существенно значительно большей неравновесностью продольного направления.



**Рис. 5 / Fig. 5.** Погрешности аппроксимации для  $f(c_x)$  и  $f(c_y)$  различными макроскопическими моделями для структуры плоской ударной волны / Approximation errors for  $f(c_x)$  and  $f(c_y)$  by various macroscopic models for the structure of a plane shock wave

*Источник:* составлено авторами

Результаты подтверждают, что наибольшая ошибка при малой плотности наблюдается для моделей, основанных на методе Града: G13 и R13. С другой стороны, при промежуточных плотностях порядка 0.05 ошибка этих моделей становится меньше, чем у уравнений Барнетта. Интересно отметить, что равновесное максвелловское распределение имеет заведомо большую ошибку по сравнению со всеми остальными рассмотренными неравновесными моделями лишь при плотностях выше 0.1.

### Заключение

Функции распределения молекулярных скоростей, предсказанные различными макроскопическими моделями течения одноатомного газа, были сопоставлены с эталонным решением ПСМ для плоской ударной волны и задачи стационарного регулярного отражения ударной волны. Для обеих задач рассматривались сильные ударные волны с числом Маха 8, что обеспечивало существенную степень неравновесности течения и нематвелловскую, многомодальную форму функции распределения скоростей по ПСМ. Можно заключить, что все макроскопические модели довольно плохо предсказывают функцию распределения скоростей в верхней по потоку области низкой плотности, где течение по сути является неравновесным. Наблюдается не только высокая ошибка аппроксимации, но и нефизические осцилляции фазовой плотности со значительно отрицательными значениями. Примечательно, но

наиболее сложная и точная модель (в смысле предсказания распределений макропараметров) – система уравнений R13 – оказывается худшей при предсказании неравновесных распределений. По мере продвижения вниз по потоку, в сторону более высокой плотности и более локально равновесных условий, все осцилляции и расхождения между моделями постепенно исчезают. В нижней по потоку части течения в обеих задачах все макроскопические модели предсказывают картину достаточно хорошо.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Cercignani C. The Boltzmann Equation and Its Applications. Berlin: Springer, 1988. 455 p.
2. Аристов В. В., Черемисин Ф. Г. Консервативный метод расщепления для решения уравнения Больцмана // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1980. Т. 20. № 1. С. 191–207.
3. Ohwada T. Structure of normal shock waves: Direct numerical analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules // Physics of Fluids A: Fluid Dynamics. 1993. Vol. 5. Iss. 1. P. 217–234. DOI: 10.1063/1.858777.
4. Bird G. A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. 476 p.
5. Иванов М. С., Рогазинский С. В. Сравнительный анализ алгоритмов метода прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1988. Т. 28. № 7. С. 1058–1070.
6. Ivanov M. S., Gimelshein S. F. Computational Hypersonic Rarefied Flows // Annual Review of Fluid Mechanics. 1998. Vol. 30. P. 469–505. DOI: 10.1146/annurev.fluid.30.1.469.
7. Struchtrup H. Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows. Berlin: Springer, 2005. 258 p.
8. Torrilhon M. Modeling Nonequilibrium Gas Flow Based on Moment Equations // Annual Review of Fluid Mechanics. 2016. Vol. 48. No. 1. P. 429–458. DOI: 10.1146/annurev-fluid-122414-034259.
9. Коган М. Н. Динамика разреженного газа: кинетическая теория. М.: Наука, 1967. 440 с.
10. Chapman S., Cowling T. G. The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases. Cambridge: Cambridge University Press, 1991. 423 p.
11. Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1949. Vol. 2. Iss. 4. P. 331–407. DOI: 10.1002/cpa.3160020403.
12. Pham-Van-Diep G. C., Erwin D. A., Muntz E. P. Testing continuum descriptions of low-Mach-number shock structures // Journal of Fluid Mechanics. 1991. Vol. 232. P. 403–413. DOI: 10.1017/S0022112091003749.
13. Erofeev A. I., Friedlander O. G. Macroscopic Models for Non-equilibrium Flows of Monatomic Gas and Normal Solutions // Rarefied Gas Dynamics: Proceedings of 25th

- International Symposium. Novosibirsk: Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 2007. P. 117–124.
14. Study of the Shock Wave Structure by Regularized Grad's Set of Equations / I. E. Ivanov, M. Y. Timokhin, I. A. Kryukov, Y. A. Bondar, A. A. Kokhanchik, M. S. Ivanov // AIP Conference Proceedings. 2012. Vol. 1501. Iss. 1. P. 215–222. DOI: 10.1063/1.4769507.
  15. Timokhin M. Yu., Ivanov I. E., Kryukov I. A. Moment equations and gas-kinetic scheme application to numerical simulation of gas flows in micro scale devices // AIP Conference Proceedings. 2014. Vol. 1628. Iss. 1. P. 748–755. DOI: 10.1063/1.4902668.
  16. Westerkamp A., Torrilhon M. Finite element methods for the linear regularized 13-moment equations describing slow rarefied gas flows // Journal of Computational Physics. 2019. Vol. 389. P. 1–21. DOI: 10.1016/j.jcp.2019.03.022.
  17. Zheng Y., Struchtrup H. Burnett equations for the ellipsoidal statistical BGK model // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2004. Vol. 16. P. 97–108. DOI: 10.1007/s00161-003-0143-3.
  18. The analysis of different variants of R13 equations applied to the shock-wave structure / M. Yu. Timokhin, H. Struchtrup, A. A. Kokhanchik, Ye. A. Bondar // AIP Conference Proceedings. 2016. Vol. 1786. Iss. 1. Article no. 140006. DOI: 10.1063/1.4967637.
  19. Gu X. J., Emerson D. R. A high-order moment approach for capturing non-equilibrium phenomena in the transition regime // Journal of Fluid Mechanics. 2009. Vol. 636. P. 177–216. DOI: 10.1017/S002211200900768X.
  20. Timokhin M. Yu., Ivanov I. E., Kryukov I. A. 2D Numerical Simulation of Gas Flow Interaction with Solid Wall by Regularized Grad's Set of Equations // AIP Conference Proceedings. 2012. Vol. 1501. Iss. 1. P. 843–848. DOI: 10.1063/1.4769630.
  21. Семейство программных систем SMILE для прямого статистического моделирования течений разреженных газов / А. В. Кашковский, П. В. Ващенко, А. А. Шевырин, А. Н. Молчанова, А. С. Литвинцев и др. // Инженерно-физический журнал. 2025. Т. 98. № 7. С. 1850–1878.
  22. Parallel Object-Oriented Software System for DSMC Modeling of High-Altitude Aerothermodynamic Problems / M. S. Ivanov, A. V. Kashkovsky, P. V. Vashchenkov, Ye. A. Bondar // AIP Conference Proceedings. 2011. Vol. 1333. Iss. 1. P. 211–218. DOI: 10.1063/1.3562650.
  23. Becker R. Stoßwelle und Detonation // Zeitschrift für Physik. 1922. Vol. 8. No. 1. P. 321–362. DOI: 10.1007/BF01329605.
  24. Mott-Smith H. M. The Solution of the Boltzmann Equation for a Shock Wave // Physical Review. 1951. Vol. 82. P. 885–892. DOI: 10.1103/PhysRev.82.885.
  25. Yen S. M. Temperature Overshoot in Shock Waves // Physics of Fluids. 1966. Vol. 9. Iss. 1. P. 1417–1418. DOI: 10.1063/1.1761862.
  26. Xu K., Huang J.-C. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows // Journal of Computational Physics. 2010. Vol. 229. Iss. 20. P. 7747–7764. DOI: 10.1016/j.jcp.2010.06.032.
  27. Hansen K., Hornig D. F. Thickness of Shock Fronts in Argon // Journal of Chemical Physics. 1960. Vol. 33. Iss. 3. P. 913–916. DOI: 10.1063/1.1731288.

28. Alsmeyer H. Density Profiles in Argon and Nitrogen Shock Waves Measured by the Absorption of an Electron Beam // *Journal of Fluid Mechanics*. 1976. Vol. 74. Iss. 3. P. 497–513. DOI: 10.1017/S0022112076001912.
29. Pham-Van-Diep G., Erwin D., Muntz E. P. Nonequilibrium Molecular Motion in a Hypersonic Shock Wave // *Science*. 1989. Vol. 245. Iss. 4918. P. 624–626. DOI: 10.1126/science.245.4918.624.
30. Shock-wave Thickness Influence to the Light Diffraction on a Plane Shock Wave / M. Yu. Timokhin, M. Tikhonov, I. V. Mursenkova, I. A. Znamenskaya // *Physics of Fluids*. 2020. Vol. 32. Iss. 11. Article no. 116103. DOI: 10.1063/5.0029612.
31. Rankine W. J. M. On the thermodynamic theory of waves of finite longitudinal disturbance // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*. 1870. Vol. 160. P. 277–288. DOI: 10.1098/rstl.1870.0015.
32. Lockerby D. A., Reese J. M., Struchtrup H. Switching criteria for hybrid rarefied gas flow solvers // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2009. Vol. 465. Iss. 2105. P. 1581–1598. DOI: 10.1098/rspa.2008.0497.
33. Timokhin M., Rukhnikov D. Local non-equilibrium phase density reconstruction with Grad and Chapman-Enskog methods // *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Vol. 1959. Iss. 1. Article no. 012049. DOI: 10.1088/1742-6596/1959/1/012049.
34. Cai Z., Torrillon M. On the Holway-Weiss debate: Convergence of the Grad-moment-expansion in kinetic gas theory // *Physics of Fluids*. 2019. Vol. 31. Iss. 12. Article no. 126105. DOI: 10.1063/1.5127114.

## REFERENCES

1. Cercignani, C. (1988). *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Berlin: Springer.
2. Aristov, V. V. & Cheremisin, F. G. (1980). The conservative splitting method for solving Boltzmann's equation. In: *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 20 (1), 191–207 (in Russ.).
3. Ohwada, T. (1993). Structure of normal shock waves: Direct numerical analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules. In: *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 5 (1), 217–234. DOI: 10.1063/1.858777.
4. Bird, G. A. (1994). *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford: Clarendon Press.
5. Ivanov, M. S. & Rogazinskii, S. V. (1988). Comparative analysis of direct simulation algorithms in rarefied gas dynamics. In: *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 28 (7), 1058–1070 (in Russ.).
6. Ivanov, M. S. & Gimelshein, S. F. (1998). Computational Hypersonic Rarefied Flows. In: *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30, 469–505. DOI: 10.1146/annurev.fluid.30.1.469.
7. Struchtrup, H. (2005). *Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows*. Berlin: Springer.
8. Torrillon, M. (2016). Modeling Nonequilibrium Gas Flow Based on Moment Equations. In: *Annual Review of Fluid Mechanics*, 48 (1), 429–458. DOI: 10.1146/annurev-fluid-122414-034259.
9. Kogan, M. N. (1967). *Dynamics of rarefied gas: kinetic theory*. Moscow: Nauka (in Russ.).

10. Chapman, S. & Cowling, T. G. (1991). *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases*. Cambridge: Cambridge University Press.
11. Grad, H. (1949). On the kinetic theory of rarefied gases. In: *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 2 (4), 331–407. DOI: 10.1002/cpa.3160020403.
12. Pham-Van-Diep, G. C., Erwin, D. A. & Muntz, E. P. (1991). Testing continuum descriptions of low-Mach-number shock structures. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 232, 403–413. DOI: 10.1017/S0022112091003749.
13. Erofeev, A. I. & Friedlander, O. G. (2007). Macroscopic Models for Non-equilibrium Flows of Monatomic Gas and Normal Solutions. In: *Rarefied Gas Dynamics: Proceedings of 25th International Symposium*. Novosibirsk: Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, pp. 117–124.
14. Ivanov, I. E., Timokhin, M. Y., Kryukov, I. A., Bondar, Y. A., Kokhanchik, A. A. & Ivanov, M. S. (2012). Study of the Shock Wave Structure by Regularized Grad's Set of Equations. In: *AIP Conference Proceedings*, 1501 (1), 215–222. DOI: 10.1063/1.4769507.
15. Timokhin, M. Yu., Ivanov, I. E. & Kryukov, I. A. (2014). Moment equations and gas-kinetic scheme application to numerical simulation of gas flows in micro scale devices. In: *AIP Conference Proceedings*, 1628 (1), 748–755. DOI: 10.1063/1.4902668.
16. Westerkamp, A. & Torrilhon, M. (2019). Finite element methods for the linear regularized 13-moment equations describing slow rarefied gas flows. In: *Journal of Computational Physics*, 389, 1–21. DOI: 10.1016/j.jcp.2019.03.022.
17. Zheng, Y. & Struchtrup, H. (2004). Burnett equations for the ellipsoidal statistical BGK model. In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 16, 97–108. DOI: 10.1007/s00161-003-0143-3.
18. Timokhin, M. Yu., Struchtrup, H., Kokhanchik, A. A. & Bondar, Ye. A. (2016). The analysis of different variants of R13 equations applied to the shock-wave structure. In: *AIP Conference Proceedings*, 1786 (1), 140006. DOI: 10.1063/1.4967637.
19. Gu, X. J. & Emerson, D. R. (2009). A high-order moment approach for capturing non-equilibrium phenomena in the transition regime. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 636, 177–216. DOI: 10.1017/S002211200900768X.
20. Timokhin, M. Yu., Ivanov, I. E. & Kryukov, I. A. (2012). 2D Numerical Simulation of Gas Flow Interaction with Solid Wall by Regularized Grad's Set of Equations. In: *AIP Conference Proceedings*, 1501 (1), P. 843–848. DOI: 10.1063/1.4769630.
21. Kashkovsky, A. V., Vashchenkov, P. V., Shevyrin, A. A., Molchanova, A. N. & Litvintsev, A. S. et al. (2025). SMILE family of software systems for the direct Monte Carlo simulations of rarefied gas flows. In: *Journal of engineering physics and thermophysics*, 98, 1872–1897. DOI: 10.1007/s10891-026-03266-8.
22. Ivanov, M. S. Kashkovsky, A. V., Vashchenkov, P. V. & Bondar, Ye. A. (2011). Parallel Object-Oriented Software System for DSMC Modeling of High-Altitude Aerothermodynamic Problems. In: *AIP Conference Proceedings*, 1333 (1), 211–218. DOI: 10.1063/1.3562650.

23. Becker, R. (1922). Stoßwelle und Detonation. In: *Zeitschrift für Physik*, 8 (1), 321–362. DOI: 10.1007/BF01329605.
24. Mott-Smith, H. M. (1951). The Solution of the Boltzmann Equation for a Shock Wave. In: *Physical Review*, 82, 885–892. DOI: 10.1103/PhysRev.82.885.
25. Yen, S. M. (1966). Temperature Overshoot in Shock Waves. In: *Physics of Fluids*, 9 (1), 1417–1418. DOI: 10.1063/1.1761862.
26. Xu, K. & Huang, J.-C. (2010). A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows. In: *Journal of Computational Physics*, 229 (20), 7747–7764. DOI: 10.1016/j.jcp.2010.06.032.
27. Hansen, K. & Hornig, D. F. (1960). Thickness of Shock Fronts in Argon. In: *Journal of Chemical Physics*, 33 (3), 913–916. DOI: 10.1063/1.1731288.
28. Alsmeyer, H. (1976). Density Profiles in Argon and Nitrogen Shock Waves Measured by the Absorption of an Electron Beam. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 74 (3), 497–513. DOI: 10.1017/S0022112076001912.
29. Pham-Van-Diep, G., Erwin, D. & Muntz, E. P. (1989). Nonequilibrium Molecular Motion in a Hypersonic Shock Wave. In: *Science*, 245 (4918), 624–626. DOI: 10.1126/science.245.4918.624.
30. Timokhin, M. Yu., Tikhonov, M., Mursenkova, I. V. & Znamenskaya, I. A. (2020). Shock-wave Thickness Influence to the Light Diffraction on a Plane Shock Wave. In: *Physics of Fluids*, 32 (11), 116103. DOI: 10.1063/5.0029612.
31. Rankine, W. J. M. (1870). On the thermodynamic theory of waves of finite longitudinal disturbance. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 160, 277–288. DOI: 10.1098/rstl.1870.0015.
32. Lockerby, D. A., Reese, J. M. & Struchtrup, H. (2009). Switching criteria for hybrid rarefied gas flow solvers. In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 465 (2105), 1581–1598. DOI: 10.1098/rspa.2008.0497.
33. Timokhin, M. & Rukhmakov, D. (2021). Local non-equilibrium phase density reconstruction with Grad and Chapman-Enskog methods. In: *Journal of Physics: Conference Series*, 1959 (1), 012049. DOI: 10.1088/1742-6596/1959/1/012049.
34. Cai, Z. & Torrilhon, M. (2019). On the Holway-Weiss debate: Convergence of the Grad-moment-expansion in kinetic gas theory. In: *Physics of Fluids*, 31 (12), 126105. DOI: 10.1063/1.5127114.

---

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Тимохин Максим Юрьевич (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносов; старший научный сотрудник Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук;  
<http://orcid.org/0000-0001-8529-5300>; e-mail: [timokhin@physics.msu.ru](mailto:timokhin@physics.msu.ru)

*Бондарь Евгений Александрович* (г. Новосибирск) – кандидат физико-математических наук, заместитель директора по научной работе Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук; старший научный сотрудник физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносов;  
<https://orcid.org/0000-0002-9439-6573>; e-mail: [bond@itam.nsc.ru](mailto:bond@itam.nsc.ru)

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Maksim Yu. Timokhin* (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University; Senior Researcher, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Science;  
<http://orcid.org/0000-0001-8529-5300>; e-mail: [timokhin@physics.msu.ru](mailto:timokhin@physics.msu.ru)

*Yevgeniy A. Bondar* (Novosibirsk) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Deputy Director for Research, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Science (ITAM SB RAS); Senior Researcher, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University.  
<https://orcid.org/0000-0002-9439-6573>; e-mail: [bond@itam.nsc.ru](mailto:bond@itam.nsc.ru)

**Original research article**

УДК 544.25, 535.5

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-4-77-87

**FLEXIBLE OPTICALLY REWRITABLE E-PAPER BASED ON NANOTECHNOLOGY****Chigrinov V. G.<sup>1,2,3,4\*</sup>, Kurilov A. D.<sup>1</sup>, Kudreyko A. A.<sup>5</sup>**<sup>1</sup> Federal State University of Education, Moscow, Russian Federation<sup>2</sup> Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba, Moscow, Russian Federation<sup>3</sup> Nanjing Jingcui Optical Technology Co., Ltd., Nanjing, China<sup>4</sup> Yaroslav-the-Wise Novgorod State University, Novgorod, Russia<sup>5</sup> Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russia

\*Corresponding author, e-mail: eechigr@ust.hk

Received by the editorial office 10.11.2025

Accepted for publication 14.11.2025

**Abstract****Aim.** Development of low-cost flexible Optically Rewritable E-paper using nanotechnology to address the challenge of aligning liquid crystals on plastic substrates.**Methodology.** The approach is based on nanosized azo-dye photoaligning layers, which enable high-quality liquid crystal alignment on flexible plastics without the high-temperature processes required by conventional methods.**Results.** The fabricated E-paper demonstrates fast response (<2 s), low writing energy (<1 J/cm<sup>2</sup>), and over 1000 rewrite cycles. The device is mechanically robust, complex driving electronics is not needed**Research implications.** This technology enables a mass production of low-cost, durable flexible displays for applications like price tags, advertising and smart cards, positioning optically rewritable E-paper as a strong competitor in the E-paper market.**Keywords:** azo dye, flexible substrates, nematic liquid crystal, optically rewritable electronic paper, photoalignment**Acknowledgments:** This work was supported by the grant from the Federal State University of Education in 2025, awarded to the winning research project in the competitive grant program.**For citation:**Chigrinov, V. G., Kurilov, A. D. & Kudreyko, A. A. (2025). Flexible optically rewritable E-paper based on nanotechnology. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 4, pp. 77–87. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-77-87>

**Научная статья** **ГИБКАЯ ПЕРЕЗАПИСЫВАЕМАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ БУМАГА НА ОСНОВЕ  
НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ****Чигринов В. Г.<sup>1,2,3,4\*</sup>, Курилов А. Д.<sup>1</sup>, Кудрейко А. А.<sup>5</sup>**<sup>1</sup> Государственный университет просвещения, г. Москва, Российская Федерация<sup>2</sup> Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы, г. Москва, Российская Федерация<sup>3</sup> Нанкинская компания ООО «Цзинцуй Оптическая Технология», г. Нанкин, Китайская Народная Республика<sup>4</sup> Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Новгород, Российская Федерация<sup>5</sup> Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация

\*Корреспондирующий автор, e-mail: eechigr@ust.hk

Поступила в редакцию 10.11.2025

Принята к публикации 14.11.2025

**Аннотация**

**Цель:** разработка гибкой оптически перезаписываемой электронной бумаги (ORW E-paper) с использованием нанотехнологии для решения проблемы ориентации жидких кристаллов на гибких пластиковых подложках.

**Процедура и методы.** В основе метода лежит использование наноразмерных фотоориентирующих слоёв на основе азокрасителей, которые обеспечивают высококачественную ориентацию жидких кристаллов на гибких пластиках без высокотемпературных процессов, требуемых традиционными методами.

**Результаты.** Созданная электронная бумага демонстрирует высокое быстродействие (<2 с), низкую энергию записи (<1 Дж/см<sup>2</sup>) и возможность более 1000 циклов перезаписи. Устройство механически устойчиво, не требует сложной управляющей электроники и отличается низкой себестоимостью.

**Теоретическая и практическая значимость.** Технология открывает путь к массовому производству недорогих и долговечных гибких дисплеев для применения в ценниках, рекламе, смарт-картах и т. д., позиционируя ORW E-paper как конкурентоспособного игрока на рынке электронной бумаги.

**Ключевые слова:** азокраситель, гибкие подложки, нематический жидкий кристалл, оптически перезаписываемая электронная бумага, фотоориентация

**Благодарности и источники финансирования.** Работа выполнена в рамках реализации научно-исследовательского проекта-победителя конкурса на получение гранта Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Государственный университет просвещения» в 2025 году.

**Для цитирования:**

Чигринов В. Г., Курилов А. Д., Кудрейко А. А. Гибкая перезаписываемая электронная бумага на основе наноструктурированных материалов // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 4. С. 77–87. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-77-87>

## Introduction

The idea behind electronic paper (E-paper) is to store and display information on a paper-like carrier with ultra-low or zero power consumption during the non-updating period. Flexibility, readability, and multi-functionality are the main expectations for E-paper [1]. In particular, electrophoretic displays (EPDs), in which charged particles are electrically controlled, are the most widely used technology for E-paper, with applications in e-readers, shelf labels, and so forth [2]. However, with liquid crystal displays (LCDs) dominating the flat panel display market for decades, several liquid crystal (LC)-based candidates have also been developed for E-paper, the most mature being cholesteric LCDs [3], zenithal bistable devices (ZBDs) [4] and bistable nematic (BiNem) displays [5]. Generally, the power consumption of traditional LCDs is related to the driving frequency, and the applied voltage on individual pixels must be maintained even for a steady image. However, similar to EPDs' inherent behavior of bistability, LC E-paper only consumes power if the image is updated, and the refreshed image can be maintained for years with zero power consumption. LC molecules between the crossed polarizers work as the shutter with an applied voltage to realize bright or dark states. Meanwhile LC E-paper suffers from high-level complexity of the driving electronics, which often fail for flexible displays due to the insufficient durability of the flexible conductor and contact bonding.

Flexible liquid crystal E-paper possesses evident advantages over the existing E-paper technologies in color, video rate (fast response) and image quality. The color gamut is much better, as stable continuous gray scale (multi-stability) is possible. The large area LCD and thin film transistor (TFT) driving is possible. However, the LC alignment on plastic substrates is really a problem, as rubbed polyimide layers usually used in LC alignment require a very high imidization temperature ( $> 250^{\circ}\text{C}$ ), which is incompatible with typical plastic substrates. New nanosize (3-10 nm thick) photoaligning (PA) materials were developed for this purpose [6–10]. They have (i) high order parameter; (ii) excellent alignment quality of the LCD with a high contrast ratio in liquid crystal electrooptical modes; (iii) temperature and UV-stability due to the polymerization and cross-linking effects in the dye layers; (iv) perfect adhesion and high azimuthal and polar anchoring energy; (v) excellent sensitivity, which enables roll-to-roll processing.

Photoalignment of nematic liquid crystals represents an emerging technology for the production of liquid crystal devices with novel properties, e.g., lenses, reconfigurable optical networks, index-tunable antireflective coatings and optically rewritable phase gratings [6]. One of these devices is flexible optically rewritable electronic paper (ORW E-paper), which is a reflective display with a photosensitive substrate coated by an azo dye layer with a thickness of 10-15 nm. This display technology has gained significant attention from scholars due to its light weight, low cost, small thickness and easy processing [7–11].

Photoalignment of liquid crystals has obvious advantages over substrate-rubbing technology due to its application on curved and flexible substrates, high resolution and absence of mechanical damage on the surface. Nanosized photoaligning layers are very good materials for implementation of flexible ORW E-paper [10; 11], since the

photoaligning films are robust and possess rather good LC aligning properties with sufficiently high anchoring energies, image sticking and voltage holding ratios. Another advantage of photoalignment technology for e-paper is its thermal stability up to 100eC. Thus, photopatterning techniques, mechanical flexibility characteristics, thermally stable birefringence characteristics enabled us to fabricate flexible and lightweight color.

Further investigation in flexible ORW e-paper should be devoted to the following questions: (i) extension of color performance with a wide color triangle; (ii) effective outdoor performance under direct sunlight; (iii) further optimization of photoalignment azo dye materials and LCs used for the purpose with a high stability and fast writing/erasing time. We foresee possible applications of flexible ORW E-paper in the following: (i) indoor and outdoor sign and advertising labels; (ii) price labels in supermarkets; (iii) displays on flexible cards; (iv) conference labels; (v) personal digital assistants (PDAs) [12].

### Results of ORW E-paper

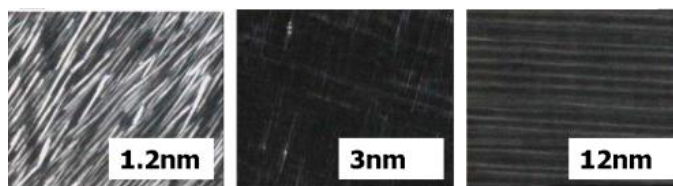
Flexible LC E-paper possesses evident advantages over the existing E-paper technologies in color, video rate (fast response) and image quality. The color gamut is much better, as stable continuous gray scale (multi-stability) is possible. The large area LCD and thin film transistor driving is possible.

However, the LC alignment on plastic substrates is really a problem, as rubbed polyimide layers usually used in LC alignment require a very high imidization temperature ( $> 250\text{eC}$ ), which is incompatible with typical plastic substrates. New nanosize (3-10 nm thick) photoaligning materials were developed for this purpose.

They have (i) high order parameter; (ii) excellent alignment quality of the LCD with a high contrast ratio in liquid crystal electrooptical modes; (iii) temperature and UV-stability due to the polymerization and cross-linking effects in the dye layers; (iv) perfect adhesion and high azimuthal and polar anchoring energy; (v) excellent sensitivity, which enables roll-to-roll processing.

We will show certain results of ORW E-paper below.

Fig. 1 shows, how that the quality of LC alignment strongly depends on the thickness of the PA layer. The thickness of the azodye alignment layer should be properly adjusted, especially in case of ferroelectric liquid crystal (FLC) materials with a high spontaneous polarization [13].



**Fig. 1 / Рис. 1.** The best quality of ferroelectric LC alignment is achieved at 3 nm thickness of nano-size PA layer / Наилучшее качество выравнивания сегнетоэлектрического ЖК достигается при толщине наноразмерного слоя ПА 3 нм

Source: [13].

The new photo-aligning materials and novel LCD based on nanoscale photo-aligning layers were investigated. Both photo-polymerized and photo-cross linked azo-dye PA films were studied, as well as new dye-polymer PA systems.

Photoalignment possesses obvious advantages in comparison with a wide-spread rubbing treatment of the liquid crystal. Possible benefits for using this technique include [6]:

(i) Elimination of electrostatic charges and impurities as well as mechanical damage of the surface;

(ii) Controllable pretilt angle and anchoring energy of the liquid crystal cell, as well as high thermal, UV stability and ionic purity;

(iii) Possibility to produce the structures with the required LC director alignment within the selected areas of the cell, thus allowing pixel dividing to enable new special LC device configurations for transfective, multi-domain, 3D and other new display types;

(iv) Potential increase of manufacturing yield, especially in LCDs with active matrix addressing, where fine tiny pixels of a high resolution LCD screen are driven by thin film transistors on a silicone substrate;

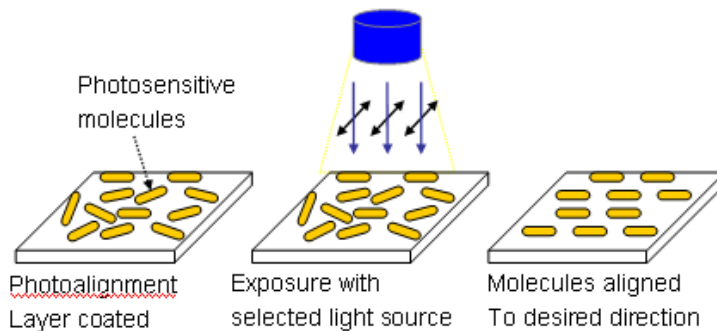
(v) New advanced applications of LC in fiber communications, optical data processing, holography and other fields, where traditional rubbing alignment is not possible due to the sophisticated geometry of LC cell and/or high spatial resolution of the processing system;

(vi) Ability for efficient LC alignment on curved and flexible substrates;

(vii) Manufacturing of new optical elements for LC technology, such as patterned polarizers and phase retarders, tunable optical filters, polarization non-sensitive optical lenses, with voltage controllable focal distance etc.

The ability to align liquid crystals highly depends on the presence and the position of several groups within the molecular structure. It affects the interaction of molecules with each other in the thin solid photosensitive film, as well as the interaction of liquid crystal with such photoalignment films. We are very close on the understanding of the photoalignment on the molecular level. To clarify the phenomena additional experiments and synthesis of several clean compounds are necessary.

We have concentrated on the aspects of the new materials, which are critical for the LCD technology such as good adhesion to flexible substrates, UV and IR stability, non-absorbance in the visible region, surface uniformity and fine resolution of the photo-induced surface, acceptable voltage holding ratio (VHR) and residual DC current (RDC) to minimize the effect of ions. We had a first look for the mixtures of azo-dye structures with very good results. Photoalignment of azo-dye molecules in a nano-layer perpendicular to the polarization of the incident light is shown on Fig. 2.

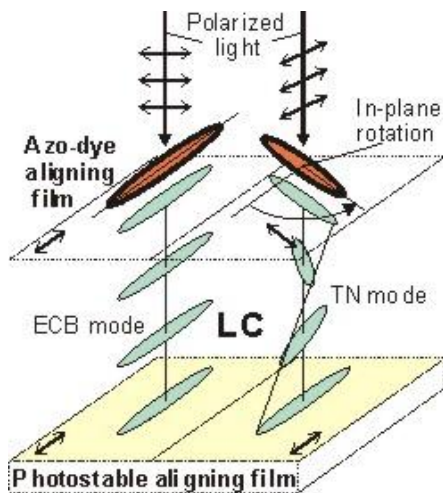


**Fig. 2 / Рис. 2.** Photoalignment of azo-dye molecules in a nano-layer perpendicular to the polarization of the incident light / Фотоориентация молекул азокрасителя в нанослое перпендикулярно поляризации падающего света

Source: [6].

The order parameter of the dye layer should be sufficiently high to obtain a good quality of LC alignment. Our goal is to develop PA materials, which exhibit sufficiently high anchoring energies to avoid the surface defects of the LC. Another goal is to get any pretilt angle on the PA substrate. We have already developed the methods of UV-light illumination, which provide the promising results. We hope that new PA materials as well as sandwich and heterogeneous structures, which exhibit both homeotropic and homogeneous tendency for LC aligning, will help to solve the problem of getting any desirable value of the LC pretilt angle on the flexible PA substrate. We have developed the novel types of LCD on flexible substrates, using the photoaligning technology in nanoscale alignment layers. The success in this development was guaranteed by a proper choice of the PA layer, ITO coating, LC material and controlling method.

The new developments included Optically Rewritable LC technology (new E-paper) that provides controllable patterned, reversible planar or vertical, liquid crystal alignment. The image is truly stable, written to grey level with saturation and rewritten a large number of times with high reproducibility of properties. We have come out with low power consuming high efficiency ORW-device which have three major parts: optically rewritable azo-dye photoalignment and ORW LCD with polarizer-substrates, LED-exposure light source and phase-mask LCD polarization rotator. The new E-paper is lightweight thin, paper-like image carrier with good brightness, high contrast and full viewing angle and capable to display either 2D or both 2D&3D images. The principle of the ORW E-paper is based on the reversible photoalignment of the PA nanolayer, which involves the corresponding realignment of the adjacent LC layer with changing the twist angle (Fig. 3). The picture becomes visible, if put between the pair of the polarizers (Fig. 3). The image can be written and erased reversibly thousands of times with a high resolution.



**Fig. 3 / Рис. 3.** Reversible LC realignment in a twist LC layer / Обратимая переориентация жидкого кристалла в слое жидкого кристалла с обратной ориентацией (twist LC)

Source: [6].

The image can be bright on the dark background or dark on the bright background depending on the location of the polarizers, crossed or parallel to each other (Fig. 4).



**Fig. 4 / Рис. 4.** ORW E-paper image under crossed and parallel polarizers / Изображение на оптически перезаписываемой электронной бумаге при использовании скрещенных и параллельных поляризаторов.

Source: [6].

We elaborated the new highly sensitive ORW photoaligning materials and liquid crystal layers with the following characteristics: response time less than 2 sec, writing energy less than 1 J/cm<sup>2</sup> with more than 1000 reversible cycles and implemented the blue LED light printer as an exposure light source. Optically rewritable technique is highly desirable, as E-paper displays suffer from the high level complexity of driving electronic due to the insufficient durability of flexible conductor and contact bonding.

The advantages of ORW E-paper: no drivers, no current conducting layer, high thickness tolerance, the technology is very cheap (the price of ORW E-paper is equal to the price of two polarizers, i.e. about 20 USD/m<sup>2</sup>). The ORW technology is highly

compatible with flexible substrates. The new ORW technology is a pioneer innovation in flexible LCD E-paper and will easily find its application in E-paper market. The possible but not limiting applications of the optically rewritable liquid crystal displays based on photoalignment are light printable rewritable paper, labels and plastic card displays, as well as rewritable 3D paper for security applications (Fig. 5).



**Fig. 5 / Рис. 5.** From left to right: ORW E-paper for advertisements, plastic cards and security applications / Слева направо: оптически перезаписываемая электронная бумага для рекламы, пластиковых карт и приложений безопасности

Source: [6].

Flexible E-paper LCD new cell can tolerate pressure, hitting and bending. As shown in Fig. 6, we can still see the image clearly with good quality due to the sticky spacers and fixed LC cell gap.



**Fig. 6 / Рис. 6.** ORW E-paper in plastic substrates is tolerant to mechanical pressure / Оптически перезаписываемая электронная бумага на пластиковых подложках устойчива к механическому давлению

Source: [6].

## Conclusions

A series of our research studies developed an approach to deal with flexible substrates. Flexible optically rewritable E-paper may successfully compete with other E-paper technologies, including electronic ink. The possible production of flexible ORW E-paper was shown using the DMD and roll-to-roll processes. The images on flexible E-paper were demonstrated on a smart card. Potential applications of flexible ORW E-paper include price labels in supermarkets, indoor and outdoor advertisements, conference labels, etc.

## REFERENCES

1. Yang, B. R. (2022). *E-Paper Displays*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons.
2. Yang, B. R., Hu, W. J., Zeng, Z., Wu, Z. Y., Gu, Y. F., Xu, J. Z., Cao, J. X., Zhang, Y. D. & Chen, P. (2021). Understanding the mechanisms of electronic ink operation. In: *Journal of the Society for Information Display*, 29 (1), 38–46. DOI: 10.1002/jsid.960.
3. Tokunaga, S., Itoh, Y., Yaguchi, Y., Tanaka, H., Araoka, F., Takezoe, H. & Aida, T. (2016). Electrophoretic Deposition for Cholesteric Liquid-Crystalline Devices with Memory and Modulation of Reflection Colors. In: *Advanced Materials*, 28 (21), 4077–4083. DOI: 10.1002/adma.201600258.
4. Spencer, T. J., Care, C. M., Amos, R. M. & Jones, J. C. (2010). Zenithal bistable device: comparison of modeling and experiment. In: *Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 82 (2), 021702. DOI: 10.1103/PhysRevE.82.021702.
5. Liu, P., Tseng, M. C., Yeung, F. S. Y. & Kwok, H. S. (2020). P-136: A Low Voltage, Switchable, Bistable-Twist Nematic Display. In: *SID Symposium Digest of Technical Papers*, 51 (1), 1889–1892. DOI: 10.1002/sdtp.14277.
6. Chigrinov, V. G., Kozenkov, V. M. & Kwok H. S. (2008). *Photoalignment of Liquid Crystalline Materials: Physics and Applications*. Chichester, England: John Wiley & Sons.
7. Chigrinov, V. G. & Kudreyko, A. A. (2021). Tunable optical properties for ORW e-paper. In: *Liquid Crystals*, 48 (7), 1073–1077. DOI: 10.1080/02678292.2020.1842924.
8. Kudreyko, A. & Chigrinov, V. (2022). Structural and optical characteristics of flexible optically rewritable electronic paper. In: *Crystals*, 12 (8), 1149. DOI: 10.3390/cryst12081149.
9. Kudreyko, A. & Chigrinov, V. (2022). Optimization of image writer modes for optically rewritable electronic paper. In: *Liquid Crystals*, 49 (4), 436–441. DOI: 10.1080/02678292.2021.1975837.
10. Muravsky, A., Murauski, A., Chigrinov, V. & Kwok, H. S. (2008). New properties and applications of rewritable azo-dye photoalignment. In: *Journal of the Society for Information Display*, 16 (9), 927–931. DOI: 10.1889/1.2976652.
11. Muravsky, A., Murauski, A., Chigrinov, V. & Kwok, H. S. (2008). Optical rewritable electronic paper. In: *IEICE Transactions on Electronics*, E91.C (10), 1576–1580. DOI: 10.1093/ietele/e91-c.10.1576.
12. Zhang, W., Srivastava, A., Chigrinov, V. & Kwok, H. S. (2022). Optically rewritable liquid crystal display. In: Yang B. R. (ed.). *E-paper Displays*. Chichester, England: John Wiley & Sons, pp. 171–196. DOI: 10.1002/9781119745624.ch8.

13. Guo, Q., Yan, K., Chigrinov, V., Zhao, H. & Tribelsky, M. (2019). Ferroelectric liquid crystals: physics and applications. In: *Crystals*, 9 (9), 470. DOI: 10.3390/cryst9090470.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Yang B. R. E-Paper Displays. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, 2022. 320 p.
2. Understanding the mechanisms of electronic ink operation / B. R. Yang, W. J. Hu, Z. Zeng, Z. Y. Wu, Y. F. Gu, J. Z. Xu, J. X. Cao, Y. D. Zhang, P. Chen // *Journal of the Society for Information Display*. 2021. Vol. 29. Iss. 1. P. 38–46. DOI: 10.1002/jsid.960.
3. Electrophoretic Deposition for Cholesteric Liquid-Crystalline Devices with Memory and Modulation of Reflection Colors / S. Tokunaga, Y. Itoh, Y. Yaguchi, H. Tanaka, F. Araoka, H. Takezoe // *Advanced Materials*. 2016. Vol. 28. Iss. 21. P. 4077–4083. DOI: 10.1002/adma.201600258.
4. Zenithal bistable device: comparison of modeling and experiment / T. J. Spencer, C. M. Care, R. M. Amos, J. C. Jones // *Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. 2010. Vol. 82. Iss. 2. Article no. 021702. DOI: 10.1103/PhysRevE.82.021702.
5. P-136: A Low Voltage, Switchable, Bistable-Twist Nematic Display / P. Liu, M. C. Tseng, F. S. Y. Yeung, H. S. Kwok // *SID Symposium Digest of Technical Papers*. 2020. Vol. 51. Iss. 1. P. 1889–1892. DOI: 10.1002/sdtp.14277.
6. Chigrinov V. G., Kozenkov V. M., Kwok H. S. Photoalignment of Liquid Crystalline Materials: Physics and Applications. Chichester, England: John Wiley & Sons, 2008. 248 p.
7. Chigrinov V. G., Kudreyko A. A. Tunable optical properties for ORW e-paper // *Liquid Crystals*. 2021. Vol. 48. Iss. 7. P. 1073–1077. DOI: 10.1080/02678292.2020.1842924.
8. Kudreyko A., Chigrinov V. Structural and optical characteristics of flexible optically rewritable electronic paper // *Crystals*. 2022. Vol. 12. Iss. 8. Article no. 1149. DOI: 10.3390/cryst12081149.
9. Kudreyko A., Chigrinov V. Optimization of image writer modes for optically rewritable electronic paper // *Liquid Crystals*. 2022. Vol. 49. Iss. 4. P. 436–441. DOI: 10.1080/02678292.2021.1975837.
10. New properties and applications of rewritable azo-dye photoalignment / A. Muravsky, A. Murauski, V. Chigrinov, H. S. Kwok // *Journal of the Society for Information Display*. 2008. Vol. 16. Iss. 9. P. 927–931. DOI: 10.1889/1.2976652.
11. MOptical rewritable electronic paper photoalignment / A. Muravsky, A. Murauski, V. Chigrinov, H. S. Kwok // *IEICE Transactions on Electronics*. 2008. Vol. E91.C. Iss. 10. P. 1576–1580. DOI: 10.1093/ietele/e91-c.10.1576.
12. Optically rewritable liquid crystal display / W. Zhang, A. Srivastava, V. Chigrinov, H. S. Kwok // *E-paper Displays* / ed. B. R. Yang. Chichester, England: John Wiley & Sons, 2022. P. 171–196. DOI: 10.1002/9781119745624.ch8.
13. Ferroelectric liquid crystals: physics and applications / Q. Guo, K. Yan, V. Chigrinov, H. Zhao, M. Tribelsky // *Crystals*. 2019. Vol. 9. Iss. 9. Article no. 470. DOI: 10.3390/cryst9090470.

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Vladimir G. Chigrinov* (Moscow) – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Senior Researcher, Laboratory of Theoretical and Applied Nanotechnology, Federal State University of Education; Prof., Department of Mechanics and Control Processes, Engineering Academy, Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba; Nanjing Jingcui Optical Technology Co., Ltd.; Leading Scientist, Yaroslav-the-Wise Novgorod State University;  
<https://orcid.org/0000-0003-0593-2555>; e-mail: [eechigr@ust.hk](mailto:eechigr@ust.hk)

*Aleksandr D. Kurilov* (Moscow) – Cand. Sci., (Phys.-Math.), Laboratory Head, Laboratory of Theoretical and Applied Nanotechnology, Federal State University of Education;  
<https://orcid.org/0000-0001-8915-2411>; e-mail: [ad.kurilov@guppros.ru](mailto:ad.kurilov@guppros.ru)

*Aleksey A. Kudreyko* (Ufa) – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of General Physics, Ufa University of Science and Technology;  
<https://orcid.org/0000-0001-7211-0741>; e-mail: [akudreyko@uust.ru](mailto:akudreyko@uust.ru)

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

*Чигринов Владимир Григорьевич* (г. Москва) – доктор физико-математических наук, профессор, старший научный сотрудник учебно-научной лаборатории теоретической и прикладной нанотехнологии Государственного университета просвещения; профессор кафедры механики и процессов управления Инженерной академии Российского университета дружбы народов имени Патриса Лумумбы; Нанкинская компания ООО «Цзинцуй Оптическая Технология»; ведущий учёный Новгородского государственного университета имени Ярослава Мудрого;  
<https://orcid.org/0000-0003-0593-2555>; e-mail: [eechigr@ust.hk](mailto:eechigr@ust.hk)

*Курилов Александр Дмитриевич* (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, заведующий учебно-научной лабораторией теоретической и прикладной нанотехнологии Государственного университета просвещения;  
<https://orcid.org/0000-0001-8915-2411>; e-mail: [ad.kurilov@guppros.ru](mailto:ad.kurilov@guppros.ru)

*Кудрейко Алексей Альфредович* (г. Уфа) – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Уфимского университета науки и технологий;  
<https://orcid.org/0000-0001-7211-0741>; e-mail: [alexkudreyko@mail.ru](mailto:alexkudreyko@mail.ru)

# МАТЕМАТИКА

---

Научная статья

УДК 372.851

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-4-88-99

## НЕЙРОСЕТИ В ОБУЧЕНИИ МАТЕМАТИКЕ

*Забелина С. Б.\*, Пинчук И. А., Грицькова Л. С., Шаммаи Ирани С. М.*

*Государственный университет просвещения, г. Москва, Российская Федерация*

*\*Корреспондирующий автор, e-mail: sb.zabelina@guppros.ru*

*Поступила в редакцию 16.09.2025*

*Принята к публикации 26.09.2025*

### **Аннотация**

**Цель** – демонстрация процесса перехода использования цифровых возможностей в обучении математическим дисциплинам от систем автоматизации к интеллектуальным ассистентам, способным взаимодействовать с обучающимися в диалоговом режиме.

**Процедура и методы.** Анализ научной и учебно-методической литературы, посвящённой применению искусственного интеллекта в образовании, в частности дидактическим аспектам интеграции нейросетей, оценке эффективности их использования в образовании. Моделирование и проектирование нейросетевой модели обучения студентов для автоматической генерации заданий, объяснений решения задач и организации обратной связи.

**Результаты.** Предложен вариант нейросетевой модели обучения для генерации обучающих заданий, формирования техники пояснений и осуществления обратной связи на примере изучения в курсе математического анализа формулы Тейлора и её приложений студентами первых курсов университетов.

**Теоретическая и практическая значимость** работы заключается в разработке методических рекомендаций для преподавателей по организации процедуры взаимодействия обучающихся и интеллектуального тьютора – искусственного интеллекта – в ходе самостоятельной учебной деятельности по усвоению содержания разделов и тем математических дисциплин, вызывающих наибольшую частоту затруднений в понимании сущности и значимости математического содержания.

**Ключевые слова:** интеллектуальный тьютор, модель, нейросеть, самостоятельная учебная деятельность

**Благодарности и источники финансирования.** Работа проведена на основе поручения о выполнении НИР в соответствии с приказом № Пр-1189 «Об итогах конкурса на получение

грантов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Государственный университет просвещения» в 2025 году» от 07.07.2025.

**Для цитирования:**

Нейросети в обучении математике / С. Б. Забелина, И. А. Пинчук, Л. С. Грицькова, С. М. Шаммаи Ирани // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 4. С. 88–99. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-88-99>.

## Original research article

### NEURAL NETWORKS IN TEACHING MATHEMATICS

*S. Zabelina\*, I. Pinchuk, L. Gritskova, S. Shammai Irani*

*Federal State University of Education, Moscow, Russian Federation*

*\*Corresponding author, e-mail: zabelina.sb@guppros.ru*

*Received by the editorial office 16.09.2025*

*Accepted for publication 26.09.2025*

#### **Abstract**

**Aim.** The aim of this study is demonstration of the process of transitioning the use of digital capabilities in teaching mathematical disciplines from automation systems to intelligent assistants capable of interacting with students in a dialog mode.

**Methodology.** The analysis of scientific and educational literature devoted to the use of artificial intelligence in education, in particular the didactic aspects of integrating neural networks and assessing the effectiveness of their use in education. Modeling and designing a neural network model for student learning for automatic generation of assignments, explanations of problem solutions, and feedback organization.

**Results.** A variant of a neural network learning model for generating learning tasks, developing explanation techniques and implementing feedback is proposed using the example of studying the Taylor formula and its applications in a course on mathematical analysis by first-year university students.

**Research implications.** The practical significance lies in the development of methodological recommendations for teachers on organizing the procedure for interaction between students and an intelligent tutor in the course of independent learning activities to master the content of sections and topics of mathematical disciplines that cause the greatest frequency of difficulties in understanding the essence and significance of mathematical content.

**Keywords:** intelligent tutor, model, neural network, independent learning activities

**Acknowledgments.** The work was carried out on the basis of an order to carry out research and development work in accordance with Order No. Pr-1189 “On the results of the competition for grants from the Federal State University of Education in 2025” dated 07.07.2025.

#### **For citation:**

Zabelina, S. B., Pinchuk, I. A., Gritskova, L. S. & Shammai Irani, S. M. (2025). Neural networks in teaching mathematics. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 4, pp. 88–99. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-88-99>

## Введение

Цифровизация как процесс активно проникает во все сферы жизни человеческого общества, добавляя новые возможности и с этим новые вызовы, в частности перед педагогическим сообществом. Отметим основные проявления влияния цифровизации на образовательную сферу. В первую очередь, появился новый формат обучения – дистанционный. Появились новые формы взаимодействия в системе учитель – ученик: записанные видеолекции, вебинары, которые можно прослушивать или посещать в удобное для обучающегося время, ставить на паузу, при необходимости прослушивать несколько раз. Сами видеолекции стали отличаться большей наглядностью в виду использования инфографики и анимации, что в свою очередь обеспечивает более глубокое погружение в учебный материал абстрактного содержания, особенно по математическим дисциплинам [1]. Во-вторых, цифровые технологии позволили многократно ускорить процессы поиска необходимой информации, её обработки, улучшили качество вычислительных процессов. Преподаватели получили возможность не тратить большое количество времени на выполнение рутинной, трудоёмкой работы, а высвободить его для научно-педагогического творчества. Применение цифровых технологий позволило повысить эффективность обучения учащихся с особыми возможностями по здоровью за счёт разнообразия модальности подачи информации (например, преобразования текстовой информации в аудиальную или визуальную), да и сам процесс обучения стал носить более выраженный адаптивный и индивидуальный характер [2]. Однако процесс цифровизации приносит и негативные моменты в обучение. Многие исследователи отмечают проявление «синдрома снижения когнитивной активности» обучающегося, поскольку нейросети предлагают уже готовые решения на сформулированную задачу, лишают решающего задачу осмысления, размышления, критического оценивания при выполнении действий. Злоупотребление помощью нейросетей безусловно может привести и к снижению мыслительной активности, и к ухудшению в развитии логики доказательных рассуждений, и к замедлению и даже ухудшению речи [3; 4; 5].

Среди минусов в использовании нейросетей также можно отметить следующие:

- в ответах к заданиям, которые сгенерировал искусственный интеллект, иногда встречаются ошибочные утверждения, поэтому необходимо тщательно проверять полученные результаты, пользоваться различными источниками для их сопоставления [6];

- слишком частое использование нейросетей развивает зависимость от ожидания готовых результатов [7];

- усложняется оценка знаний обучающихся, становится бессмысленным оценивать их уровень подготовки по итогам выполнения домашних заданий, акцент на оценивание и контроль знаний переносится на работу в аудитории.

Поэтому, выполняя установки государственной политики по включению образовательной системы в процесс всеобщей цифровизации, следует с глубоким вниманием к обучающемуся грамотно выстроить учебный процесс, интегрируя в него возможности искусственного интеллекта так, чтобы искусственный интеллект выступал в роли интеллектуального тьютора для обучающегося.

### **Процедура взаимодействия обучающихся и интеллектуального тьютора – искусственного интеллекта**

Существуют различные мнения исследователей о пользе или вреде использования нейросетей в обучении. Есть приверженцы новых технологий, есть их ярые хулители. Но с необходимостью следует признать, что технологический прогресс не отменить, поэтому важно преподавателям, учителям, педагогам научиться самим и научить обучающихся использовать нейросети грамотно, принимая во внимание преимущества искусственного интеллекта и стараясь минимизировать вред от его использования.

Поэтому, по нашему мнению, очень важным является обучение преподавателей адекватному применению нейросетей в организации работы по развитию навыков обучающихся в этом направлении. Особенно это важно на достаточно высоких ступенях обучения, в частности, в высших учебных заведениях. Корректное использование нейросетей позволит не только повысить уровень знаний студентов, но и будет способствовать эффективной организации их самостоятельной работы, совершенствованию навыков самообучения [8].

Рассмотрим пример нейросетевой модели обучения студентов для автоматической генерации заданий, объяснений решения задач и организации обратной связи [9]. В курсе математического анализа существует тема «Разложение функций по формуле Тейлора», на которую по программе обучения выделяется не очень много времени и которая обычно вызывает большие затруднения у обучающихся из-за того, что они не очень ясно представляют себе, почему эта формула так уж необходима. Поэтому очень важно, чтобы обучающиеся познакомились с её многочисленными применениями, на изучение которых в основном курсе не остаётся времени. По итогам этого знакомства им будет предложена контрольная работа, выполнение которой будет служить критерием успешности обучения с использованием нейросетей.

В качестве нейросети для этого процесса может быть использована, например, DeepSeek.

Для начала полезным будет вспомнить саму формулу Тейлора (что тоже можно сделать с помощью нейросети). Студенты должны знать, что функция  $f(x)$ , имеющая в окрестности точки  $x_0 = a$  производные до  $(n + 1)$ -го порядка включительно, может быть записана в виде

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x),$$

где  $P_n(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n$  – многочлен Тейлора  $n$  степени,  $R_n(x)$  – остаточный член (погрешность приближения).

Важно, что это точная формула, а не просто приближение. Приближением является многочлен Тейлора, а остаточный член точно указывает на величину ошибки этого приближения. Также полезно напомнить частный случай формулы Тейлора – формулу Маклорена, которая получается, если  $a = 0$ .

Далее задаём вопрос нейросети о том, где применяется формула Тейлора. Получаем описание нескольких наиболее важных применений этой формулы (и её частного случая), причём эти описания сопровождаются пояснениями, комментариями и некоторыми примерами. Рассмотрим эти приложения.

Вычисление сложных пределов. Это одно из наиболее важных применений формулы. Разложение позволяет найти предел, когда методы Лопиталья слишком громоздки или неприменимы (например, когда этот метод придётся применить несколько раз). В качестве примера рассмотрим вычисление предела функции

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos(x) - e^{-\frac{x^2}{2}}}{x^4}.$$

Здесь мы имеем дело с классической неопределённостью  $\frac{0}{0}$ , для раскрытия которой можно применить правило Лопиталья, но для достижения успеха его придётся применять несколько раз, что не очень рационально. Поэтому вычислим этот предел с помощью разложения Маклорена.

Разложим числитель до слагаемых порядка  $x^4$ :

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + o(x^4) = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + o(x^4),$$

$$e^t = 1 + t + \frac{t^2}{2!} + o(t^2).$$

Подставим  $t = -\frac{x^2}{2}$ :

$$e^{-\frac{x^2}{2}} = 1 + \left(-\frac{x^2}{2}\right) + \frac{\left(-\frac{x^2}{2}\right)^2}{2!} + o(x^4) = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{8} + o(x^4).$$

Теперь вернёмся к вычислению предела, имеем:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos(x) - e^{-\frac{x^2}{2}}}{x^4} &= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\left(1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + o(x^4)\right) - \left(1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{8} + o(x^4)\right)}{x^4} = \\ &= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\frac{x^4}{24} - \frac{x^4}{8} + o(x^4)}{x^4} = \lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{1}{24} - \frac{1}{8} + o(1)\right) = \frac{1}{24} - \frac{1}{8} = -\frac{1}{12}. \end{aligned}$$

Решение гораздо более компактное.

Приближенные вычисления значений функции, особенно элементарных, с заданной точностью. Для примера вычислим значение  $e^{0,5}$  с точностью до 0,001. Используем разложение

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots$$

и подставим в неё  $x = 0,5$  :

$$e^{0,5} = 1 + 0,5 + \frac{(0,5)^2}{2!} + \frac{(0,5)^3}{3!} + \frac{(0,5)^4}{4!} + \frac{(0,5)^5}{5!}$$

Подсчитаем все слагаемые и суммируем их:

$$1 + 0,5 = 1,5;$$

$$1 + 0,5 + 0,125 = 1,625;$$

$$1 + 0,5 + 0,125 + 0,020833 \approx 1,6458333;$$

$$1 + 0,5 + 0,125 + 0,020833 + 0,002604 \approx 1,648437;$$

$$1 + 0,5 + 0,125 + 0,020833 + 0,002604 + 0,000260416 \approx 1,648697.$$

Оценим остаточный член. Он меньше первого отброшенного члена.

Следующий член  $\frac{(0,5)^6}{720} \approx 0,0000217 < 0,001$ . Значит, уже на пятом слагаемом мы достигли нужной точности. Таким образом, искомое значение функции примерно 1,649 (с точностью до 0,001).

Анализ поведения функции в окрестности точки (выявление экстремумов, точек перегиба). Разложение Тейлора позволяет по коэффициентам многочлена определить характер критической точки. Особенно это эффективно, если по тем или иным причинам найти и исследовать первую или вторую производную функции нельзя или слишком сложно. Приведём такой пример. Исследуем на экстремум функцию

$$f(x) = x^3 \sin \frac{1}{x}$$

в точке  $x = 0$ , если мы её доопределим как  $f(0) = 0$ . Здесь сложно провести исследование с помощью первой производной, поэтому запишем для этой функции формулу Маклорена (сначала запишем разложение для  $\sin(t)$ , которое хорошо известно, потом заменяем в этом разложении  $t$  на  $\frac{1}{x}$  и умножаем разложение на  $x^3$ , тогда окончательно имеем, что

$$f(x) = x^3 \cdot \left( \frac{1}{x} - \frac{1}{6x^2} + o\left(\frac{1}{x^3}\right) \right) = x^2 - \frac{1}{6} + o(1)$$

при  $x \rightarrow 0$ . Таким образом, вблизи нуля  $f(x) = -\frac{1}{6} + x^2 + \dots$  (главная часть – квадратичный член  $x^2$  с положительным коэффициентом 1). Это означает, что в точке  $x = 0$  функция имеет локальный минимум, равный 0 (так как  $f(0) = 0$ , а  $-\frac{1}{6}$  – это лишь поправка из разложения).

Другим важным приложением формулы Тейлора являются приближенные вычисления, нахождения приближенных значений функций, а для этого

необходимо уметь оценить, какую ошибку мы допустим, если оборвём ряд на конечном члене.

Для примера оценим погрешность вычисления  $\sin(0,1)$  по первым двум слагаемым формулы Тейлора. Запишем остаточный член в форме Лагранжа

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{6} + R_4(x),$$

где  $R_4(x) = \frac{\sin^{(4)}(\xi)}{4!} \cdot x^4 = \frac{\sin(\xi)}{24} \cdot x^4$ . Здесь  $\xi$  – некоторое значение из интервала  $(0, x)$ . Анализируя значение остаточного члена, мы получим, что такое приближение  $\sin(0,1)$  имеет абсолютную погрешность меньше, чем  $4,2 \cdot 10^{-6}$ .

И, наконец, ещё одно применение формулы Тейлора, на котором необходимо сфокусироваться, это вычисление интегралов от функций, особенно в случаях, когда известные правила интегрирования работают плохо.

Как хорошо известно, интегралы от функций типа  $e^{-x^2}$ ,  $\sin(x^2)$ ,  $\frac{\sin(x)}{x}$  не выражаются в элементарных функциях, для вычисления их определённых интегралов с любой точностью можно заменить подынтегральную функцию многочленом и проинтегрировать его.

Так, например, для вычисления  $\int_0^{0,5} e^{-x^2} dx$  с точностью до 0,0001, поступим следующим образом.

Используем формулу Маклорена для разложения функции  $e^{-x^2}$ :

$$e^{-x^2} = 1 - x^2 + \frac{x^4}{2!} - \frac{x^6}{3!} + \frac{x^8}{4!} - \dots$$

Интегрируем почленно многочлен, стоящий слева, и подставляем пределы интегрирования. Подсчитываем каждое слагаемое и сравниваем его с заданной точностью. Так продолжаем до тех пор, пока очередное слагаемое не окажется меньше требуемой точности. Тогда погрешность суммы будет меньше модуля первого отброшенного члена (так как ряд знакопеременный).

Таким образом, самостоятельная работа студентов по теме «Формула Тейлора», проводимая ими и направляемая с помощью нейросети, позволит им как овладеть техникой разложения функций и представления их в виде полиномов, так и научиться применять формулу Тейлора и оценить важность и эффективность такого применения.

Для проверки их знаний, а также для оценки уровня сформировавшихся компетенций целесообразно провести контрольную работу, в которую включить как базовые задания, связанные с получением непосредственных разложений, так и задания более высокого уровня, выполнение которых станет критерием глубокого усвоения изученного материала.

При составлении контрольной работы также целесообразно обратиться к использованию нейросети. Это позволит подобрать задания оптимального

уровня сложности, для решения которых необходимые вычисления будут выполнимыми, но не слишком тривиальными.

Тогда примерный состав задач по данной теме может быть следующим.

1. Разложение функции по формуле Тейлора или Маклорена до указанного порядка (это задание базового уровня).

2. Вычисление пределов для случая, когда правило Лопиталья если даже и применимо, то сопряжено с реально громоздкими вычислениями.

3. Нахождение приближенных значений функции с заданной точностью, оценка погрешности вычислений.

4. Задание на использование разложения Тейлора для исследования поведения функции в окрестности точки (например, при поиске экстремумов).

5. Задание на вычисление определенного интеграла от функции, которая не берётся в элементарных функциях, с заданной точностью (используя разложение подынтегральной функции по формуле Тейлора).

Результатом «переговоров» с нейросетью может быть такой вариант контрольной работы.

1. Напишите многочлен Маклорена с остаточным членом в форме Пеано для функции  $f(x) = e^{-x} \cos(x)$  с помощью стандартных разложений (привести пять первых ненулевых членов).

2. Вычислите пределы функций, используя разложения по формуле Маклорена до достаточного порядка:

$$\text{а) } \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos(3x) - 1 + 4,5x^2}{x^4};$$

$$\text{б) } \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\ln(1+3x) - \sin(3x) + 8x^2}{x^3}.$$

3. Используя формулу Маклорена, вычислите значение  $\ln(1,1)$  с точностью до 0,0001. Оцените погрешность вашего приближения, используя остаточный член в форме Лагранжа.

4. Для функции  $f(x) = e^x - 1 - x - \frac{x^2}{2}$  в точке  $x=0$  найдите многочлен Маклорена 3-го порядка. Определите, имеет ли функция в этой точке локальный экстремум. Если да, то какой (максимум или минимум)? Ответ обоснуйте, анализируя многочлен Маклорена.

5. Используя разложение подынтегральной функции в ряд Маклорена, вычислите с точностью до 0,001 значение определенного интеграла  $\int_0^{0,5} \sin(x^2)$ .

### Заключение

Использование нейросети позволит организовать как самостоятельную работу обучающихся, направленную на овладение тем или иным разделом математики, так и эффективную проверку достигнутого результата.

Нейросетевая модель обучения студентов в перспективе нацелена на решение следующих задач:

- научить студентов создавать комплексные системные блоки знаний из разнородного, на их взгляд, содержания учебных дисциплин;
- создать условия для обогащения знаний студентов;
- стимулировать поисковую самостоятельность студентов, будировать их исследовательскую активность;
- создавать адаптированную к их когнитивным способностям и творческому потенциалу образовательную среду [10].

В качестве перспектив использования нейросетевых моделей в образовании можно отметить ситуацию в обучении, когда на основе анализа запросов студента интеллектуальный тьютор адаптирует учебный материал, создавая для конкретного студента индивидуальную программу обучения [11]. Второе направление перспективного использования нейросетевых моделей – это стимулирование активного диалога между студентом и интеллектуальным тьютором, когда студент задаёт вопросы, получает рекомендации по осмыслению изучаемого материала, что соответствует концепции обучения через совместную деятельность [12].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Искусственный интеллект в образовании: направления применения и ограничения / В. И. Абрамов, А. В. Гриншкун, А. В. Елисеев, Н. С. Корнева, Т. Н. Суворова // Современная {цифровая} дидактика. Т. 2: коллективная монография. М: ООО «А-Приор», 2023. С. 89–98.
2. Холмс У., Бялик М., Фейдл Ч. Искусственный интеллект в образовании: Перспективы и проблемы для преподавания и обучения. М.: Альпина, 2022. 303 с.
3. Аветисян А. И. Искусственный интеллект в гуманитарной сфере. Угрозы и возможности // Вестник Российской академии наук. 2024. Т. 94. № 7. С. 623–628. DOI: 10.31857/S0869587324070028.
4. Sharath Kumar C. R., Praveena K. B. SWOT analysis // International Journal of Advanced Research. 2023. Vol. 11. No. 09. P. 744–748. DOI: 10.21474/ijar01/17584.
5. Hutson J., Rains T. J. Charting the AI Transition in Education and Business Environments. Navigating the Generative Inflection Point for Industry 4.0 Success. New York: Routledge, 2024. 210 p.
6. Future of Learning with Large Language Models Applications and Research in Education / eds. M. S. Khin, L. Bognar, E. Afari. New York: CRC Press, 2025. 266 p.
7. Мухаметзянов И. И., Пырнова О. А. Генерация идей и творческих решений с помощью искусственного интеллекта // Цифровые системы и модели: теория и практика проектирования, разработки и применения: материалы национальной (с международным участием) научно-практической конференции (Казань, 10–11 апреля 2024 г.). Казань: Казанский государственный энергетический университет, 2024. С. 1039–1042.
8. Цифровая дидактика: проектирование учебного занятия на базе сервисов для совместного пользования / С. Б. Забелина, И. А. Пинчук, А. В. Проданец, Л. С. Гриць-

- кова // Международный форум KAZAN DIGITAL WEEK – 2023: сборник материалов (Казань, 20–22 сентября 2023 г.). Казань: ГБУ «НЦБЖД», 2023. С. 778–785.
9. Грицькова Л. С., Пинчук И. А. Использование нейронных сетей как вспомогательного средства при обучении // Проблемы теории и практики инновационного развития и интеграции современной науки и образования: материалы V Международной научно-практической конференции (Москва, 14 февраля 2024 г.). М.: Общество с ограниченной ответственностью "ПРИНТИКА", 2024. С. 107–111.
  10. Pomerantz J., Brown M. A study of personalization of learning and adaptive technologies: current use, implementation, and design // *EDUCAUSE Review*. 2022. Vol. 57. No. 2. P. 28–41.
  11. Vidivelli S., Manikandan R., Dharunbalaji A. Efficiency-Driven Custom Chatbot Development: Unleashing LangChain, RAG, and Performance-Optimized LLM Fusion // *Computers, Materials and Continua*. 2024. Vol. 80. Iss. 2. P. 2423–2442. DOI: 10.32604/cmc.2024.054360.
  12. Бровка Н. В. Искусственный интеллект в обучении студентов математических специальностей: проблемы или перспективы? // Современная {цифровая} дидактика. Т. 2: коллективная монография. М: ООО «А-Приор», 2023. С. 56–62.

## REFERENCES

1. Abramov, V. I., Grinshkun, A. V., Eliseev, A. V., Korneva, N. S. & Suvorova, T. N. (2023). Artificial Intelligence in Education: Application Areas and Limitations. In: *Modern {digital} didactics*. Vol. 2. Moscow: LLC "A-Prior" publ., pp. 89–98 (in Russ.).
2. Holmes W., Bialik M. & Fadel Ch. (2022). *Artificial Intelligence in Education: Prospects and Challenges for Teaching and Learning*. Moscow: Alpina publ. (in Russ.).
3. Avetisyan, A. I. (2024). Artificial intelligence in the humanitarian field. Threats and opportunities. In: *Herald of the Russian Academy of Sciences*, 94 (7), 623–628. DOI: 10.31857/S0869587324070028 (in Russ.).
4. Sharath Kumar, C. R. & Praveena, K. B. (2023). SWOT analysis. In: *International Journal of Advanced Research*, 11 (09), 744–748. DOI: 10.21474/ijar01/17584.
5. Hutson, J. & Rains, T. J. (2024). *Charting the AI Transition in Education and Business Environments. Navigating the Generative Inflection Point for Industry 4.0 Success*. New York: Routledge.
6. Khin, M. S., Bognar, L. & Afari, E. (eds.) (2025). *Future of Learning with Large Language Models Applications and Research in Education*. New York: CRC Press.
7. Mukhametzyanov, I. I. & Pynova, O. A. (2024). Generating ideas and creative solutions using artificial intelligence. In: *Digital Systems and Models: Theory and Practice of Design, Development, and Application: Proceedings of the National (with International Participation) Scientific and Practical Conference (Kazan, April 10–11, 2024)*. Kazan: Kazan State Power Engineering University publ., pp. 1039–1042 (in Russ.).
8. Zabelina, S. B., Pinchuk, I. A., Prodanets, A. V. & Gritskova, L. S. (2023). Digital didactics: designing a training session based on shared services. In: *International Forum*

- KAZAN DIGITAL WEEK – 2023: Collection of Materials (Kazan, September 20–22, 2023)*. Kazan: Scientific Center for Children's Life Safet publ., pp. 778–785 (in Russ.).
9. Gritskova, L. S. & Pinchuk, I. A. (2024). Using neural networks as an auxiliary tool in training. In: *Problems of the theory and practice of innovative development and integration of modern science and education: Proceedings of the V International scientific and practical conference (Moscow, February 14, 2024)*. Moscow: LLC "PRINTIKA" publ., pp. 107–111 (in Russ.).
  10. Pomerantz, J. & Brown, M. (2022). A study of personalization of learning and adaptive technologies: current use, implementation, and design. In: *EDUCAUSE Review*, 57 (2), 28–41.
  11. Vidivelli, S., Manikandan, R. & Dharunbalaji, A. (2024). Efficiency-Driven Custom Chatbot Development: Unleashing LangChain, RAG, and Performance-Optimized LLM Fusion. In: *Computers, Materials and Continua*, 80 (2), 2423–2442. DOI: 10.32604/cmc.2024.054360.
  12. Brovka, N. V. (2023). Artificial intelligence in teaching students of mathematical specialties: problems or prospects? In: *Modern {digital} didactics. Vol. 2*. Moscow: LLC "A-Prior" publ., pp. 56–62 (in Russ.).
- 

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

*Забелина Светлана Борисовна* (г. Люберцы, Московская обл.) – кандидат педагогических наук, доцент, доцент кафедры высшей алгебры математического анализа и геометрии Государственного университета просвещения;  
<https://orcid.org/0000-0002-3291-0899>; e-mail: [sb.zabelina@guppros.ru](mailto:sb.zabelina@guppros.ru)

*Пинчук Ирина Александровна* (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры высшей алгебры математического анализа и геометрии Государственного университета просвещения;  
<https://orcid.org/0000-0003-3192-783X>; e-mail: [irenepin@yandex.ru](mailto:irenepin@yandex.ru)

*Грицькова Людмила Сергеевна* (г. Чехов, Московская обл.) – ассистент кафедры высшей алгебры математического анализа и геометрии Государственного университета просвещения;  
<https://orcid.org/0009-0004-4187-2996>; e-mail: [Luda-gritskova@mail.ru](mailto:Luda-gritskova@mail.ru)

*Шаммаи Ирани Сюзанна Маджидовна* (г. Реутов, Московская обл.) – аспирант кафедры высшей алгебры математического анализа и геометрии Государственного университета просвещения;  
e-mail: [shammaisuzanna@gmail.com](mailto:shammaisuzanna@gmail.com)

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Svetlana B. Zabelina* (Moscow Region, Lyubertsy) – Cand. Sci. (Education), Assoc. Prof., Department of Higher Algebra, Mathematical Analysis and Geometry, Federal State University of Education;  
<https://orcid.org/0000-0002-3291-0899>; e-mail: [sb.zabelina@guppros.ru](mailto:sb.zabelina@guppros.ru)

*Irina A. Pinchuk* (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Higher Algebra, Mathematical Analysis and Geometry, Federal State University of Education; <https://orcid.org/0000-0003-3192-783X>; e-mail: irenepin@yandex.ru

*Lyudmila S. Gritskova* (Moscow Region, Chekhov) – Assistant Lecturer, Department of Higher Algebra, Mathematical Analysis and Geometry, Federal State University of Education; <https://orcid.org/0009-0004-4187-2996>; e-mail: Luda-gritskova@mail.ru

*Suzanna M. Shammai Irani* (Moscow Region, Reutov) – Postgraduate Student, Department of Higher Algebra, Mathematical Analysis and Geometry, Federal State University of Education; e-mail: shammaisuzanna@gmail.com

**Научная статья****УДК 511'1+511'2****DOI: 10.18384/2949-5067-2025-4-100-109****ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ СО СТЕПЕННЫМИ СВОЙСТВАМИ****Кан И. Д., Зверев Н. А.\*, Давиденко Е. В.***Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),  
г. Москва, Российская Федерация**\*Корреспондирующий автор, e-mail: nikolayzverev1995@gmail.com**Поступила в редакцию 24.10.2025**После доработки 10.11.2025**Принята к публикации 12.11.2025***Аннотация**

**Цель** настоящей работы заключается в доказательстве теорем о существовании, несуществовании и делимости степенных последовательностей. Степенные последовательности, рассматриваемые в статье, состоят из элементов, на которых обобщаются свойства известных диофантовых уравнений, например, неразрешимое уравнение из Великой теоремы Ферма или уравнение, связывающее длины сторон прямоугольного треугольника по теореме Пифагора.

**Процедуры и методы.** В настоящей работе используются в основном методы элементарной теории чисел.

**Результаты.** Результатом работы являются полностью доказанные теоремы о последовательностях, обобщающих диофантовы уравнения высоких степеней.

**Теоретическая значимость** исследования заключается в обобщении понятия диофантовых уравнений на множество последовательностей. Работа носит сугубо теоретический характер.

**Ключевые слова:** великая теорема Ферма, диофантово уравнение, пифагоровы тройки, последовательность, теорема Пифагора

**Благодарности:** исследование выполнено в рамках гранта РФФИ № 25-21-00273 «Исследование научных основ вывода теорем Ламе и Бургейна-Конторовича с целью их уточнения и обобщения на более широкие классы аргументных множеств».

**Для цитирования:**

Кан И. Д., Зверев Н. А., Давиденко Е. В. Последовательности со степенными свойствами // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. 2025. № 4. С. 100–109. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-100-109>

**Original research article****SEQUENCES WITH POWER-LAW PROPERTIES****I. Kan, N. Zverev\*, E. Davidenko***Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russian Federation**\*Corresponding author, e-mail: nikolayzverev1995@gmail.com**Received by the editorial office 24.10.2025**Revised by the author 10.11.2025**Accepted for publication 12.11.2025***Abstract**

**Aim.** The purpose of this paper is to prove theorems on the existence, nonexistence, and divisibility of power sequences. The power sequences considered in this paper consist of elements that generalize the properties of well-known Diophantine equations, such as the unsolvable equation in Fermat's Last Theorem or the equation relating the lengths of the sides of a right triangle using the Pythagorean theorem.

**Methodology.** In this work, the methods of elementary number theory were mainly used. In this work, the methods of elementary number theory were mainly used.

**Results.** The result of the work is completely proven theorems on sequences generalizing Diophantine equations of high degrees.

**Research implications.** The theoretical significance of this study lies in its generalization of the concept of Diophantine equations to a set of sequences. The work is purely theoretical in nature.

**Keywords:** Fermat's Great Theorem, The Diophantine equation, Pythagorean triples, sequence, The Pythagorean Theorem

**Acknowledgments.** This research was supported by an RNF grant No. 25-21-00273 "A study of the scientific foundations of the derivation of the Lamé and Bourgain-Kontorovich theorems with the aim of refining them and generalizing them to wider classes of argument sets."

**For citation:**

Kan, I. D., Zverev, N. A. & Davidenko, E. V. (2025) Sequences with power-law properties. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 4, pp. 100–109. <https://doi.org/10.18384/2949-5067-2025-4-100-109>

**Введение**

Великая теорема Ферма, состоящая в том, что уравнение вида

$$x^n + y^n = z^n$$

не имеет решений в натуральных числах  $\forall n > 2$ , как известно, в течение более чем трёхсот лет оставалась лишь популярной гипотезой, попытки доказать которую<sup>1</sup> во многом стимулировали развитие нескольких разделов высшей

<sup>1</sup> Абраров Д. Теорема Ферма: феномен доказательств Уайлса // Полит.ру. URL: <https://web.archive.org/web/20210505041125/https://polit.ru/article/2006/12/28/abrarov/> (дата обращения: 20.08.2025); Кирсанов Ф. История Великой Теоремы Ферма [Электронный ресурс] // Открытый текст: [сайт]. URL: <https://open-textnn.ru/man/kirsanov-f-istorija-teoremy-ferma/?ysclid=mh0lw9iu2c922304676> (дата обращения: 20.08.2025).

алгебры [1–8]. Однако в середине прошлого века эта история неожиданно продолжилась сдвигом в сторону алгебраической геометрии.

Так, в сентябре 1955 г. японский математик Ютака Танияма сформулировал гипотезу о модулярности эллиптических кривых, которая была уточнена Горо Шимуры в 1957 г. [9]. О гипотезе в 1970-е гг. вспомнил и начал её активное изучение француз Андре Вейль, поэтому эту гипотезу часто называют гипотезой Таниямы – Шимуры – Вейля [10]. Гипотезой широко заинтересовались уже в 1985 г., когда Герхард Фрай предположил, что гипотеза Таниямы – Шимуры (тогда она называлась именно так) является обобщением Великой теоремы Ферма, потому как любой контрпример к последней приводил в итоге к немодулярной эллиптической кривой [11]. В 1986 г. Кен Рибет доказал предположение о взаимосвязи между этими проблемами. В 1995 г. Эндрю Уайлс и Ричард Тейлор доказали особый случай теоремы Таниямы – Шимуры (случай полустабильных эллиптических кривых), которого было достаточно для доказательства Великой теоремы Ферма [12]. Полностью теорема о модулярности была доказана в 1999 г. в результате трудов Кристофа Брейля, Брайана Конрада, Фреда Даймонда и Ричарда Тейлора, которые, основываясь на работе Уайлса, доказали остальные (неполустабильные) случаи.

Из теоремы о модулярности следуют и другие теоремы теории чисел, похожие на Великую теорему Ферма. Например, «куб числа не может быть записан в виде суммы двух взаимно простых чисел, являющихся  $n$ -ной степенью натурального числа, если  $n > 3$ » [13]. Так появляется мысль складывать несколько натуральных степеней, получая снова целую степень. В настоящей работе эта идея обобщается до бесконечной последовательности, для каждого элемента которой его некоторая степень равна сумме степеней (возможно, с другим показателем) предшествующих ему элементов.

## 1. Постановка задачи и основные результаты статьи.

Опираясь на вышеизложенную идею, сформулируем постановку задачи. Для любых  $m, k \in \mathbb{N} : k \geq 2$  бесконечную последовательность натуральных чисел вида

$$x_1, x_2, \dots, x_n, \dots \quad (1.1)$$

назовем  $(m, k)$ -степенной последовательностью, если для любого  $n \geq 1$  сумма вида

$$x_1^m + x_2^m + \dots + x_n^m \quad (1.2)$$

представляет собой точную  $k$ -ю степень какого-либо натурального числа  $N_n$ . Таким образом, каждая  $(m, k)$ -степенная последовательность даёт набор решений для бесконечной системы диофантовых уравнений

$$x_1^m + x_2^m + \dots + x_n^m = N_n^k, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.3)$$

и, в таком смысле, является обобщением этого вида уравнений.

Вопрос, который для каждой пары чисел  $m$  и  $k$  естественным образом возникает из этого определения, заключается в том, существуют ли  $(m, k)$ -

степенные последовательности для таких значений параметров. Для того, чтобы дать ответ на него, сформулируем и докажем следующие три теоремы, о которых и шла речь в аннотации данной работы.

**ТЕОРЕМА 1.1.** *Не существует  $(m, k)$ -степенных последовательностей при выполнении любого из следующих четырёх условий:*

- во-первых, при равных значениях параметров  $k = m > 2$ ;
- во-вторых, если  $k$  и  $m$  имеют общий простой нечётный делитель;
- в-третьих, если  $k$  делится на 4, а  $m$  – чётно; в частности,  $(2,4)$ -степенных последовательностей не существует;
- в-четвёртых, если  $m$  делится на 4, а  $k$  – чётно; в частности,  $(4,2)$ -степенных последовательностей не существует.

**ТЕОРЕМА 1.2.** *Существует хотя бы одна  $(m, k)$ -степенная последовательность при выполнении любого из следующих трёх условий:*

- во-первых, при  $m = 1$  – для любого  $k$ ;
- во-вторых, при  $m = k = 2$ ;
- в-третьих, при  $m = 3$  и  $k = 2$ .

**ЗАМЕЧАНИЕ 1.1.** Забегая вперёд, к доказательству теоремы 1.2, сформулируем те конкретные виды последовательностей, на которых достигаются результаты теоремы 1.2. Так,  $(1, k)$ -степенной является последовательность разностей  $k$ -х степеней соседних целых неотрицательных чисел. Далее,  $(2, 2)$ -степенной является любая последовательность вида (1.1), которая при некотором  $s \in \mathbb{N}$  определена условиями

$$x_1 = 2s + 1, \quad x_2 = 2s^2 + 2s \quad (1.4)$$

и

$$x_{n+1} = \frac{(x_n + 1)^2 - 1}{2} = \frac{(x_n + 2)x_n}{2}, \quad \forall n \geq 2; \quad (1.5)$$

Наконец,  $(3, 2)$ -степенной является последовательность всех натуральных чисел.

**ТЕОРЕМА 1.3.** *При чётных  $m$  и  $k$  для каждой  $(m, k)$ -степенной последовательности для почти всех её элементов выполняются свойства делимости:*

- во-первых, на 2 (кроме не более чем для одного из этих элементов);
- во-вторых, на 3 (кроме не более чем для одного из этих элементов);
- в-третьих, на 6 (кроме не более чем для двух из этих элементов).

## 2. Доказательство основных результатов

### 2.1. Доказательство теоремы 1.1.

Первое утверждение следует из Великой теоремы Ферма, доказанной Эндрю Вайлсом [12]. Действительно, поскольку  $k = m$ , то при  $k > 2$  уже для  $n = 2$  из (1.3) получаем неразрешимое уравнение Ферма

$$x_1^m + x_2^m = N_2^m,$$

и первое утверждение теоремы доказано. В этом месте считаем необходимым подчеркнуть, что уже полностью доказано утверждение о том, что  $(m, m)$ -степенных последовательностей  $\forall m > 2$  не существует. Действительно: согласно определению таких последовательностей, каждая сумма вида (1.2) должна представлять собой точную  $m$ -ю степень  $\forall n \in \mathbb{N}$  и, в частности, при  $n = 2$ . Именно невозможность этого события и была показана выше, чего вполне достаточно для доказательства.

Второе утверждение теоремы доказывается аналогично. Так, при  $n = 2$  из (1.3) получаем:

$$x_1^m + x_2^m = N_2^k. \quad (2.1)$$

Пусть  $p$  – общий простой нечётный делитель чисел  $k$  и  $m$ , скажем,  $k = k_1 p$ ,  $m = m_1 p$ ,  $\forall \{k_1, m_1\} \in \mathbb{Z}$ . Тогда из (2.1) следует:

$$(x_1^{m_1})^p + (x_2^{m_1})^p = (N_2^{k_1})^p. \quad (2.2)$$

Однако (2.2) – это снова частный случай неразрешимого уравнения Ферма, имеющего вид  $x^p + y^p = z^p$ , поэтому второе утверждение теоремы также доказано (здесь можно сделать замечание, полностью аналогичное тому, что содержится в конце предыдущего абзаца).

Для доказательства третьего утверждения теоремы положим  $k = 4k_1$  и  $m = 2m_1$ , где по условию  $\forall \{k_1, m_1\} \in \mathbb{Z}$ . Тогда из (2.1) следует:

$$(x_1^{m_1})^2 + (x_2^{m_1})^2 = (N_2^{k_1})^4. \quad (2.3)$$

Однако при  $n = 1$  из (1.3) получаем:

$$(x_1^{m_1})^2 = x_1^m = N_1^k = (N_1^{k_1})^4. \quad (2.4)$$

Подставляя равенство (2.4) в (2.3), выводим:

$$(N_1^{k_1})^4 + (x_2^{m_1})^2 = (N_2^{k_1})^4. \quad (2.5)$$

Но, как известно, уравнение вида

$$x^4 + y^2 = z^4 \quad (2.6)$$

не имеет решений в натуральных числах ( $\forall x, y, z \in \mathbb{N}$ ) [4]. Поэтому и уравнение (2.5), как частный случай уравнения (2.6), также неразрешимо. Третье утверждение теоремы доказано.

Доказательство четвёртого утверждения теоремы опирается на известную неразрешимость похожего на (2.6) уравнения:

$$x^4 + y^4 = z^2. \quad (2.7)$$

Действительно, положим  $k = 2k_1$  и  $m = 4m_1$ , где, согласно условию, числа  $k_1$  и  $m_1$  – целые. Тогда, с учётом введённых обозначений, из (2.1) следует:

$$(x_1^{m_1})^4 + (x_2^{m_1})^4 = (N_2^{k_1})^2.$$

Поэтому предположение о существовании (4,2)-степенной последовательности противоречит неразрешимости уравнения (2.7). Теорема 1.1 доказана полностью.

## 2.2. Доказательство теоремы 1.2.

Первое утверждение следует из того, что можно положить

$$x_n = n^k - (n-1)^k, \forall n \in \mathbb{N}. \quad (2.8)$$

В этом случае, поскольку  $m = 1$ , то, согласно (2.8),

$$x_1^m + x_2^m + \dots + x_n^m = x_1 + x_2 + \dots + x_n = 1^k + (2^k - 1^k) + \dots + (n^k - (n-1)^k) = n^k,$$

и при  $N_n = n$  первое утверждение теоремы доказано.

Для доказательства второго утверждения теоремы рассмотрим последовательность (1.1), заданную условиями (1.4) и (1.5). Докажем для начала индукцией по  $n$ , что все элементы в (1.1), начиная с  $x_2$ , – чётные числа. Согласно определению,  $x_2 = 2(s^2 + s)$ , чем обеспечена база индукции. Далее из индуктивного предположения следует, что в числителе последней из дробей в (1.5) перемножаются два чётных числа. Но знаменатель сей дроби равен 2 – следовательно, дробь равна чётному числу, и утверждение о чётности (а, следовательно, и о целочисленности) чисел  $x_n$  доказано по индукции.

Положим  $S_n = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2$ . Следующее, что необходимо проверить – это выполнение при  $n \geq 2$  формулы

$$S_n = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 = (x_n + 1)^2. \quad (2.9)$$

На самом деле: так как, согласно (1.4),

$$x_1^2 + x_2^2 = (2s + 1)^2 + (2s^2 + 2s)^2 = (2s^2 + 2s + 1)^2 = (x_2 + 1)^2,$$

то база индукции проверена. Если же рассмотреть равенство (2.9) как индуктивное предположение для некоторого  $n \geq 2$  и учесть определяющую формулу (1.5), то получим:

$$S_{n+1} = (x_1^2 + \dots + x_n^2) + x_{n+1}^2 = (x_n + 1)^2 + \frac{[(x_n + 1)^2 - 1]^2}{4}. \quad (2.10)$$

Раскрывая в итоговой части равенства (2.10) квадрат разности в числителе последнего слагаемого и производя сложение с первым из них, получаем:

$$S_{n+1} = (x_n + 1)^2 + \frac{(x_n + 1)^4 - 2(x_n + 1)^2 + 1}{4} = \frac{(x_n + 1)^4 + 2(x_n + 1)^2 + 1}{4}. \quad (2.11)$$

Сворачивая в числителе последней дроби в (2.11) три слагаемых в один квадрат суммы и применяя ещё раз формулу (1.5), получаем:

$$S_{n+1} = \frac{[(x_n + 1)^2 + 1]^2}{4} = (x_{n+1} + 1)^2. \quad (2.12)$$

Согласно (2.12), формула (2.9) доказана по индукции. Полагая теперь

$$N_n = \begin{cases} x_1, & n=1, \\ x_n + 1, & \forall n > 1, \end{cases}$$

получаем, ввиду (2.9), равенство (1.3) при  $m = k = 2$ . Этим доказано второе утверждение теоремы.

Наконец, третье утверждение теоремы следует из известной формулы:

$$1^3 + 2^3 + 3^3 + \dots + n^3 = \left[ \frac{n(n+1)}{2} \right]^2, \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (2.13)$$

доказываемой простой индукцией по  $n$ . Теорема 1.2 полностью доказана.

**ЗАМЕЧАНИЕ 2.1.** Возникает естественный вопрос: насколько уникален пример (2.13) из этого доказательства? Конечно, каждую (3,2)-степенную последовательность можно легко превратить в бесконечную серию последовательностей того же вида умножением всех её элементов на квадрат любого натурального числа. Однако интересно, существует ли хотя бы один пример того же рода вне такой серии? И если да, то бесконечно ли количество попарно непропорциональных (3,2)-степенных последовательностей?

### 2.3. Доказательство теоремы 1.3.

Напомним, что мы рассматриваем  $(m, k)$ -степенную последовательность (1.1), для которой исходное уравнение (1.3) при  $m = 2m_1$  и  $k = 2k_1$  приобретает вид

$$(x_1^{m_1})^2 + (x_2^{m_1})^2 + \dots + (x_n^{m_1})^2 = (N_n^{k_1})^2, \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (2.14)$$

Для доказательства первого утверждения теоремы рассмотрим возможные случаи. Если все элементы последовательности (1.1) – чётны, то уже всё доказано. Пусть теперь в последовательности (1.1) нечётные элементы существуют, и  $l$  – минимальный индекс такого элемента. Тогда, согласно определению этого  $l$ , числа  $\{x_1, x_2, \dots, x_{l-1}\}$  – чётны, в то время как число  $x_l$  – нечётно. Поэтому, рассматривая равенство (2.14) при  $n = l$ , получаем, что  $N_l$  – нечётно. Далее, рассмотрим формулу (2.14) при  $n = l + 1$ :

$$(N_l^{k_1})^2 + (x_{l+1}^{m_1})^2 = (x_1^{m_1})^2 + (x_2^{m_1})^2 + \dots + (x_l^{m_1})^2 + (x_{l+1}^{m_1})^2 = (N_{l+1}^{k_1})^2. \quad (2.15)$$

Как известно, квадрат нечётного числа всегда сравним с 1 по модулю 4 (а квадрат чётного – с нулём). Это означает, что число  $x_{l+1}$  не может быть нечётным: в противном случае, согласно (2.15), квадрат числа  $N_{l+1}^{k_1}$  равен сумме квадратов двух нечётных чисел из начала формулы и поэтому сравним с числом 2 по модулю 4, что невозможно. Следовательно,  $x_{l+1}$  – чётно, а  $N_{l+1}$  – нечётно. Значит, число  $x_{l+2}$  также не может быть нечётным: в противном случае

$$(N_{l+1}^{k_1})^2 + (x_{l+2}^{m_1})^2 = (x_1^{m_1})^2 + (x_2^{m_1})^2 + \dots + (x_{l+1}^{m_1})^2 + (x_{l+2}^{m_1})^2 = (N_{l+2}^{k_1})^2, \quad (2.16)$$

что невозможно по аналогичным причинам (в левой части (2.16) не может находиться сумма квадратов двух нечётных чисел, равная квадрату одного целого числа из итоговой части той же формулы). Рассуждая в том же ключе,

получаем, что все числа  $\{x_{l+1}, x_{l+2}, \dots\}$  – чётны. Так что единственный нечётный элемент последовательности (1.1) – это число  $x_l$ , что и требовалось доказать. Первое утверждение теоремы доказано.

Для аналогичного доказательства второго из них также рассмотрим возможные случаи. Пусть, для начала, все элементы последовательности (1.1) делятся на 3 – тогда уже все доказано. Однако, если в той же последовательности существуют элементы, не делящиеся на 3, то пусть  $l$  – наименьший индекс такого элемента (который может не совпадать со значением  $l$  из предыдущей части доказательства). Таким образом, мы договорились, что числа  $\{x_1, x_2, \dots, x_{l-1}\}$  делятся на 3, а число  $x_l$  на 3 не делится. Тогда, рассматривая равенство (2.14) при  $n = l$ , получаем, что  $N_l$  не делится на 3. Однако, как известно, квадрат любого не делящегося на 3 числа сравним с 1 по модулю 3 (а квадрат делящегося на 3 – с нулём). Значит, число  $x_{l+1}$  не может не делиться на 3: в противном случае, согласно (2.15), квадрат числа  $N_{l+1}^k$  равен сумме квадратов двух не делящихся на 3 чисел и поэтому сравним с числом 2 по модулю 3, что невозможно. Следовательно,  $x_{l+1}$  делится на 3, а  $N_{l+1}$  – нет. Значит, число  $x_{l+2}$  также не может не делиться на 3: в противном случае, в левой части равенства (2.16) находится сумма квадратов двух не делящихся на 3 чисел, равная квадрату одного целого числа, что снова невозможно. Продолжая ту же линию рассуждений, получаем, что все числа  $\{x_{l+1}, x_{l+2}, \dots\}$  делятся на 3. Так что единственным не делящимся на 3 элементом последовательности (1.1) является число  $x_l$ , что и требовалось доказать. Второе утверждение теоремы доказано.

Третье утверждение той же теоремы следует теперь из доказанности первых двух из них. Действительно: во всей последовательности (1.1) имеется не более одного нечётного элемента, а также не более одного, который не делится на 3. Остальные же все элементы делятся и на 2, и на 3, тем самым они делятся на 6. Третье утверждение теоремы доказано. Теорема 1.3 доказана полностью.

### Заключение

Таким образом, сформулированные в постановке задачи теоремы о существовании, несуществовании и делимости степенных последовательностей полностью доказаны.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Альварес Л. Ф. Самая сложная задача в мире. Ферма. Великая теорема Ферма. М.: Де Агостини, 2015. 160 с. (Серия: Наука. Величайшие теории. Вып. 18).
2. Виолант-и-Хольц А. Загадка Ферма. Трёхвековой вызов математике. М.: Де Агостини, 2014. 151 с. (Серия: Мир математики. Т. 9).
3. Манин Ю. И., Панчишкин А. А. Введение в современную теорию чисел. М.: МЦНМО, 2009. 552 с.
4. Постников М. М. Введение в теорию алгебраических чисел. М.: Наука, 1982. 240 с.
5. Рибенбойм П. Последняя теорема Ферма для любителей. М.: Мир, 2003. 429 с.

6. Сингх С. Великая теорема Ферма. М.: МЦНМО, 2000. 288 с.
7. Хинчин А. Я. Великая теорема Ферма; 3-е издание. М.: ОНТИ, 1934. 55 с.
8. Эдвардс Г. Последняя теорема Ферма. М.: Мир, 1980. 488 с.
9. Darmon H. A Proof of the Full Shimura-Taniyama-Weil Conjecture Is Announced // *Notices of the American Mathematical Society*. 1999. Vol. 46. No. 11. P. 1397–1406.
10. Conrad B., Diamond F., Taylor R. Modularity of certain potentially Barsotti-Tate Galois representation // *Journal of the American Mathematical Society*. 1999. Vol. 12. No. 2. P. 521–567.
11. Стюарт И. Величайшие математические задачи. М.: Альпина нон-фикшн, 2016. 460 с.
12. Wiles A. Modular elliptic curves and Fermat's Last Theorem // *Annals of Mathematics*. 1995. Vol. 141. Iss. 3. P. 443–551. DOI: 10.2307/2118559.
13. Соловьев Ю. П. Гипотеза Таниямы и последняя теорема Ферма // *Соросовский Образовательный Журнал*. 1998. № 2. С. 135–138.

### REFERENCES

1. Alvarez, L. F. (2015). *The Hardest Problem in the World. Fermat. Fermat's Last Theorem*. Moscow: De Agostini publ. (Series: Science. Greatest Theories. Vol. 18) (in Russ.).
2. Violant i Holz, A. (2014). *Fermat's Riddle. A Three-Century Challenge to Mathematics*. Moscow: De Agostini publ. (Series: The World of Mathematics. Vol. 9) (in Russ.).
3. Manin, Yu. I. & Panchishkin, A. A. (2009). *Introduction to Modern Number Theory*. Moscow: Moscow: Moscow Center for Continuous Mathematical Education publ. (in Russ.).
4. Postnikov, M. M. (1982). *Introduction to the Theory of Algebraic Numbers*. Moscow: Nauka publ. (in Russ.).
5. Ribenboim, P. (2003). *Fermat's Last Theorem for Amateurs*. Moscow: Mir publ. (in Russ.).
6. Singh, S. (2000). *Fermat's Last Theorem*. Moscow: Moscow Center for Continuous Mathematical Education publ. (in Russ.).
7. Khinchin, A. Ya. (1934). *Fermat's Last Theorem*. Moscow: ONTI (United Scientific and Technical Publishing House) publ. (in Russ.).
8. Edwards, G. (1980). *Fermat's Last Theorem*. Moscow: Mir publ. (in Russ.).
9. Darmon, H. (1999). A Proof of the Full Shimura-Taniyama-Weil Conjecture Is Announced. In: *Notices of the American Mathematical Society*, 46 (11), 1397–1406.
10. Conrad, B., Diamond, F. & Taylor, R. (1999). Modularity of certain potentially Barsotti-Tate Galois representation. In: *Journal of the American Mathematical Society*, 12 (2), 521–567.
11. Stewart, I. (2016). *The Greatest Mathematical Problems*. Moscow: Alpina Non-Fiction publ. (in Russ.).
12. Wiles, A. (1995). Modular elliptic curves and Fermat's Last Theorem. In: *Annals of Mathematics*, 141 (3), 443–551. DOI: 10.2307/2118559.
13. Soloviev, Yu. P. (1998). Taniyama's Conjecture and Fermat's Last Theorem. In: *Soros Educational Journal*, 2, 135–138 (in Russ.).

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

*Кан Игорь Давидович* (г. Москва) – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, профессор кафедры № 311 «Прикладные программные средства и математические методы» Московского авиационного института (национального исследовательского университета);

ORCID: 0000-0001-8861-0580; e-mail: igor.kan@list.ru

*Зверев Николай Андреевич* (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, доцент кафедры № 311 «Прикладные программные средства и математические методы» Московского авиационного института (национального исследовательского университета);

ORCID: 0000-0002-0813-2863; e-mail: nikolayzverev1995@gmail.com

*Давиденко Екатерина Валерьевна* (г. Москва) – техник в НИО-311 (научно-исследовательском отделе кафедры № 311 «Прикладные программные средства и математические методы») Московского авиационного института (национального исследовательского университета);

ORCID: 0009-0008-5190-3484; e-mail: katya.davidenko.01@mail.ru

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Igor D. Kan* (Moscow) – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Leading Researcher, Prof., Department No. 311 “Applied Software and Mathematical Methods”, Moscow Aviation Institute (National Research University);

ORCID: 0000-0001-8861-0580; e-mail: igor.kan@list.ru

*Nikolay A. Zverev* (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Researcher, Assoc. Prof., Department No. 311 “Applied Software and Mathematical Methods”, Moscow Aviation Institute (National Research University);

ORCID: 0000-0002-0813-2863; e-mail: nikolayzverev1995@gmail.com

*Ekaterina V. Davidenko* (Moscow) – Technician, NIO-311 (Research Department of the Department No. 311 “Applied Software and Mathematical methods”), Moscow Aviation Institute (National Research University);

ORCID: 0009-0008-5190-3484; e-mail: katya.davidenko.01@mail.ru

# НАУЧНАЯ ЖИЗНЬ

---

УДК 530.145 (09)

DOI: 10.18384/2949-5067-2025-4-110-115

## ПОИСК ФОРМУЛЫ СПЕКТРАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНЕРГИИ ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ АБСОЛЮТНО ЧЕРНОГО ТЕЛА В. А. МИХЕЛЬСОНОМ

**Исаев В. И.**

*Независимый исследователь, г. Москва, Российская Федерация*

*e-mail: vis961@yandex.ru*

## SEARCH BY V. A. MICHELSON FOR THE FORMULA FOR THE SPECTRAL DISTRIBUTION OF THE BLACKBODY RADIATION ENERGY

**V. Isaev**

*Independent researcher, Moscow, Russian Federation*

*e-mail: vis961@yandex.ru*

Настоящая работа является кратким изложением одного из разделов лекционного курса по истории квантовой теории, разрабатываемого автором. Актуальность темы определяется теми приложениями, которые квантовая механика получила за последнее десятилетие – необходимостью создания квантовых компьютеров и развития систем квантовой связи, основанных на явлении квантового перепутывания связанных состояний. Без глубокого знания квантовой теории создание квантовых компьютеров и систем квантовой связи невозможно. Необходимость создания такого курса диктуется тем, что студенты при изучении квантовой теории зачастую испытывают трудности и для более глубокого понимания квантовой механики автор предлагает читать студентам одновременно курс истории квантовой теории. Дополнительным аргументом для создания такого курса также является то, что многие тонкие вопросы интерпретации квантовой механики невозможно понять, не обладая знаниями хотя бы элементарного курса истории квантовой теории.

## Часть 1. В. А. МИХЕЛЬСОН. БИОГРАФИЧЕСКИЙ ОЧЕРК



В. А. Михельсон

Владимир Александрович Михельсон родился 30 июня 1860 г. в семье гражданского инженера Александра Михайловича Михельсона в г. Тульчине [1; 2]. С 1871 г. семья Михельсонов обосновалась в Москве, в Петровско-Разумовском, где А. М. Михельсону были поручены проверка смет и строительство зданий Петровской земледельческой и лесной академии. В. А. Михельсон в том же году поступил в одну из лучших гимназий Москвы. По окончании гимназии осенью 1878 г. В. А. Михельсон поступил в Санкт-Петербургский институт инженеров путей сообщения и уже на первом году обучения перевёлся на первый курс математического отделения физико-математического факультета Московского университета.

В 1881 г. В. А. Михельсон был замечен профессором А. Г. Столетовым и стал заниматься в физическом практикуме Столетова, кото-

рый был избран в этом же году председателем физического отделения Общества любителей естествознания, антропологии и этнографии, а также директором отдела прикладной физики Политехнического музея. В. А. Михельсон стал одним из самых деятельных участников физического отделения Общества, собрания которого проходили в здании Политехнического музея [2; 3].

В 1883 г. В. А. Михельсон окончил математическое отделение Московского университета, представив в качестве кандидатского сочинение на тему: «Второй закон термодинамики с точки зрения аналитической механики и теории вероятностей». По окончании университета В. А. Михельсон был оставлен профессором Столетовым в университете для подготовки к профессорскому званию [2; 3].

В 1883-1884 гг. Михельсон работал в физической лаборатории Столетова и одновременно проходил практику по качественному анализу в химической лаборатории В. В. Марковникова, занимаясь исследованиями по физике горения газовых смесей.

В январе 1887 г. Михельсон выступил с сообщением на тему о теоретическом определении спектрального распределения энергии теплового излучения на заседании отделения физических наук Общества любителей естествознания, где были изложены развитые им физические соображения о природе спектра излучения твёрдых тел и приведена полученная им формула спектрального распределения энергии излучения абсолютно чёрного тела, которую Михельсон опубликовал в 1887-1888 гг. в европейских физических журналах.

Весной 1887 г. Михельсон успешно сдал магистерские экзамены и, прочитав две пробные лекции на темы «О распределении энергии в спектре твёрдого тела», «Об электрокапиллярных явлениях и их теории», был зачислен на долж-

ность приват-доцента кафедры физики Московского университета [2; 3]. В августе 1887 г. Михельсон по рекомендации профессора Столетова был направлен в Берлин и Страсбург для работы в лабораториях известных немецких физиков Германа Гельмгольца (1821–1894) и Августа Кундта (1839–1894). Столетов рекомендовал Михельсону первоначально поехать в Страсбург к Кундту, однако устроиться в Страсбургском университете не удалось и осенью 1887 г. Михельсон приехал в Берлинский университет к Г. Гельмгольцу [2; 3].

В начале 1888 г. А. Кундт перешёл на кафедру экспериментальной физики в Берлинский университет, которую Гельмголец передал Кундту вместе с Физическим институтом при Берлинском университете, оставив за собой лишь чтение курса теоретической физики. В Берлинском университете Михельсон прослушал курс теоретической физики Гельмгольца, курс экспериментальной физики Кундта, выполнил работы физического практикума, а также прослушал математические курсы, читавшиеся в то время в Берлинском университете. За время обучения у Михельсона появились знакомства и дружеские отношения со многими немецкими физиками, которые в это же время учились или работали в Берлинском университете, к их числу следует прежде всего отнести Вильгельма Вина (1864–1928), Кнута Ангстрема (1857–1910) и Роберта Гельмгольца (1862–1889), сына Германа Гельмгольца. С Вильгельмом Вином и Кнутом Ангстремом Михельсона впоследствии связывала многолетняя дружеская переписка, в которой они обменивались мнениями по различным научным проблемам [2–4].

В августе 1889 г. Михельсон присоединился к Столетову и другим русским физикам, приехавшим в Париж для участия в работе 2-ого Международного конгресса электриков. В Париже Михельсон по рекомендации Столетова ознакомился с работами физических лабораторий в Коллеж де Франс, Сорбонне, Международной палате мер и весов, Центральной электротехнической лаборатории, Астрономической обсерватории и некоторых других научных учреждениях Парижа. В конце 1889 г. Михельсон возвратился в Россию и у него был обнаружен туберкулёз [2; 3].

В это нелёгкое время Михельсон всё же успел закончить текст магистерской диссертации на тему «О нормальной скорости воспламенения гремучих газовых смесей» и представить работу в Совет физико-математического факультета Московского университета. Однако состояние его в конце 1889 г. ухудшилось настолько, что он не мог читать лекции и вести лабораторные занятия, ему было необходимо срочное лечение.

Весной 1890 г. по совету врачей Михельсон отправился на высокогорный курорт Давос в Швейцарию, климат которого был ему необходим для излечения, и где он пробыл до улучшения своего состояния до осени 1894 г. Излечение было очень медленным и нелёгким, но благодаря целительному действию чистого горного воздуха и солнца болезнь отступила и В. А. Михельсон был спасён [2; 3].

Как только позволило состояние здоровья, В. А. Михельсон продолжил занятия физикой и готовил магистерскую диссертацию. В течение этого нелёгкого периода профессор Столетов постоянно помогал Михельсону, в том числе материально, в частности Столетов дважды представлял его работу о распределении

энергии в спектре излучения твёрдого тела на премию им В. П. Мошнина, которая была учреждена для поддержки исследователей в области физики и химии [2–5]. Эта премия была присуждена В. А. Михельсону в 1890 г.

За четыре года вынужденного затворничества Михельсона Столетов дважды навещал его в Давосе, также он постоянно старался держать Михельсона в курсе событий в физике, высылая ему книги, журналы, отписки статей и сообщая ему новости по физическим исследованиям в России и за границей и, по словам Михельсона, «спас его для науки». За это время Столетов и Михельсон написали друг другу более сорока писем [3; 5; 6].

За время, проведённое в Давосе с осени 1892 г., Михельсон выполнил ряд работ по актинометрии (наука об измерении потоков лучистой энергии Солнца), в частности по-



А.Г. Столетов

строил в начале 1893 г. ледяной пиргелиометр – наиболее близкий по своей поглощательной способности к абсолютно чёрному телу прибор, представляющий собой ледяной калориметр, заключённый в латунный цилиндр с малым отверстием, позволяющий измерять потоки энергии в спектре излучающего тела, в частности, Солнца [2; 3].

Михельсон так писал об этом периоде своей жизни: «Я начал заниматься актинометрией осенью 1892 г., когда вследствие серьёзной болезни принуждён был долго жить в Давосе. Этот курорт расположен в высокогорной долине восточной Швейцарии на высоте около 1560 м над уровнем моря. Большая прозрачность воздуха и защищённость от ветров создаёт в этом месте условия, особенно благоприятные для исследования радиации как Солнца, так и неба и земли» [3]. Результаты актинометрических исследований и описание ледяного пиргелиометра Михельсона были доложены Столетовым в январе 1894 г. на заседании IX Съезда русских естествоиспытателей и врачей и затем опубликованы.

Возвратившись после излечения в сентябре 1894 г. в Москву, В. А. Михельсон защитил в Московском университете магистерскую диссертацию на тему «О нормальной скорости воспламенения гремучих газовых смесей», в которой была развита теория горения газовых смесей.

Диссертация в совокупности с другими научными работами Михельсона получила высокую оценку профессоров физико-математического факультета Московского университета, и по предложению профессора Столетова была сразу же засчитана как докторская [2–5; 7].

После защиты диссертации В. А. Михельсон осенью 1894 г. был назначен профессором кафедры физики и метеорологии Московского сельскохозяйственного института (с 1917 г. переименован в Петровскую сельскохозяйственную

академию, с 1923 г. это Московская сельскохозяйственная академия имени К. А. Тимирязева), где и протекала далее его плодотворная научная и преподавательская деятельность вплоть до его кончины 27 февраля 1927 г. [8; 9].

Научная деятельность В. А. Михельсона в период с 1895 по 1927 г. была связана с актинометрическими и метеорологическими исследованиями, конструированием и усовершенствованием имеющихся приборов для исследования потоков излучения. В 1905 г. по инициативе В. А. Михельсона в России была организована актинометрическая подкомиссия, вошедшая в состав Русского отделения Международного союза по исследованию Солнца, которой В. А. Михельсон руководил до конца своей жизни. В состав комиссии вошли также такие известные учёные, как Б. Б. Голицын, О. Д. Хвольсон, Б. В. Станкевич, Г. А. Любославский, Д. А. Смирнов, Н. Н. Калигин. Заседания актинометрической подкомиссии проходили в метеорологической обсерватории Московского сельскохозяйственного института, которая была признана центром актинометрических исследований в России [3; 10].

В 1907 г. Михельсон участвовал в экспедиции на Монблан, во время которой он проводил актинометрические исследования с помощью сконструированного им биметаллического пластиночного актинометра, который впоследствии получил широкое распространение в России и других странах [3; 8; 10]. В 1925 г. Михельсон построил ещё три новые модели водоструйных пиргелиометров, а также предложил проект электрического пиргелиометра, завершить который он уже не успел [3; 8; 10].

В. А. Михельсон занимался также постройкой и оборудованием специальной метеорологической обсерватории с актинометрической площадкой, 26-метровой вышкой и служебными помещениями, которая была построена по его проекту в 1909–1911 гг. на территории Московского сельскохозяйственного института. В метеорологической обсерватории под руководством В. А. Михельсона кроме актинометрических и метеорологических исследований проводились исследования по изучению испарения воды почвой и растениями, по изучению поглощения солнечной энергии растениями, по изучению физического состава почвы и составлению теплового баланса земной поверхности [3; 8; 10].

С 1914 г. Михельсоном и его сотрудниками проводились в метеорологической обсерватории аэрологические исследования с помощью метеорологических шаров-зондов, которые поднимались на высоту и фиксировали направление, скорость ветра и потоки излучения, идущие от Солнца [2; 3; 10].

Одновременно В. А. Михельсон вёл большую педагогическую деятельность, преподавая физику в Московском сельскохозяйственном институте с 1894 по 1927 г. С 1895 г. В. А. Михельсон организовал физическую лабораторию и разработал физический практикум для студентов. Учебник общего курса физики, написанный Михельсоном, выдержал 15 переизданий с 1905 по 1940 гг. и использовался в преподавании физики в российских университетах и институтах более 40 лет [7; 9].

В. А. Михельсон пользовался большим уважением в научном мире и был избран членом Общества любителей естествознания, антропологии и этнографии, Исследовательского института физики при Московском Университете, Ассоциации русских естествоиспытателей и врачей, Комиссии по воздухопла-

ванию, Московского метеорологического общества, также был избран почётным председателем Постоянной актинометрической комиссии при Главной геофизической обсерватории, председателем Комиссии по использованию энергии Солнца при Госплане СССР, членом Немецкого физического общества и Международного союза по исследованию Солнца [10; 11].

В. А. Михельсон был постоянным участником всех проходивших в России физических и метеорологических съездов, а на 5-ом физическом съезде в январе 1927 г. он был избран почётным председателем съезда [1; 9; 11]. После смерти В. А. Михельсона его имя было присвоено метеорологической обсерватории и физической аудитории Московской сельскохозяйственной академии.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Тепляков Г. М. В. А. Михельсон. М.: Изд-во «Просвещение», 1971. 88 с. (Серия «Люди науки»).
2. Михельсон В. А. Собрание сочинений. Т. 1, М.: Изд-во Новый агроном, 1930.
3. Соминский М. С. А. Г. Столетов. Л.: Изд-во «Наука», 1970. 352 с.
4. Материалы Юбилейной научной конференции, посвящённой Александру Григорьевичу Столетову (1839–1896) [28–30 июня 1969 г.] / Мин-во просвещения РСФСР, Советское нац. объединение историков естествознания и техники, Моск. гос. ун-т им. М. В. Ломоносова, Владимирский гос. пед. ин-т им. П. И. Лебедева-Полянского. Владимир: б. и., 1969. 53 с.
5. Кудрявцев П. С. История физики. Т. 2. От Менделеева до открытия квант (1870–1900 гг.). М.: Учпедгиз, 1956. С. 330–332.
6. Якобсон И. И. Владимир Александрович Михельсон (к десятилетию со дня смерти) // Природа. Популярный естественно-исторический журнал. 1937. № 12. С. 64.
7. Предводителев А. С. О научных трудах В. А. Михельсона // Вопросы истории физико-математических наук. М.: Высшая школа, 1963. С. 272–288.
8. Максимов С. А. Михельсон – выдающийся ученый-геофизик // Вопросы истории физико-математических наук. М.: Высшая школа, 1963. С. 288–295.
9. Русаков В. П. В. А. Михельсон: научная и педагогическая деятельность // Исследования по истории физики и механики – 2004. М.: Наука, 2005. С. 71–110.
10. Баутин В. М., Россинская Т. М., Глазко В. И. Памяти В. А. Михельсона // Известия Тимирязевской сельскохозяйственной академии. 2010. № 5. С. 161–173.
11. Владимир Александрович Михельсон // Выдающиеся ученые (выпускники, профессора) Петровской (Тимирязевской) академии, РГАУ – МСХА имени К. А. Тимирязева: Материалы к биобиблиографии. М.: Изд-во РГАУ-МСХА имени К. А. Тимирязева, 2010. 51 с. + 10 с. вкл.

---

#### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

*Исаев Вячеслав Игоревич* (г. Москва) – кандидат физико-математических наук, независимый исследователь;  
e-mail: vis961@yandex.ru

#### INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

*Vyacheslav I. Isaev* (Moscow) – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Independent Researcher (Moscow);  
e-mail: vis961@yandex.ru



ВЕСТНИК  
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

СЕРИЯ: ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА  
2025. № 4

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

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](mailto:sj@guppros.ru)  
Сайт: [www.physmathmgou.ru](http://www.physmathmgou.ru)

Формат 70x108/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура "Minion Pro".  
Тираж 500 экз. Усл. п. л. 7,25, уч.-изд. л. 6,75.  
Подписано в печать: 30.12.2025 г. Дата выхода в свет: 14.01.2026 г. Заказ № 2025/12-44.  
Отпечатано в Государственном университете просвещения  
105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 2