

Математическое моделирование
Mathematical modeling

УДК 535.375.5

<https://doi.org/10.32362/2500-316X-2024-12-6-91-101>

EDN ZHLMCM



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Структурные переходы в системах с трехминимумным потенциалом

Л.М. Ожерелкова[@],
Е.С. Савин,
И.Р. Тишаева,
В.В. Шевелев

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, 119454 Россия
[@] Автор для переписки, e-mail: ozherelkova@mirea.ru

Резюме

Цели. Явления, которые в последнее время изучаются физикой конденсированного состояния, привели к новым взглядам на проблемы динамической теории кристаллов. Результаты многочисленных экспериментальных данных показывают, что их невозможно объяснить, оставаясь в рамках линейных моделей динамики многочастичных систем. Необходимо учитывать существенно нелинейные эффекты. Анализ динамики систем в физике конденсированного состояния, содержащих достаточно большое число частиц, показывает, что они могут, в зависимости от потенциала межчастичного взаимодействия, испытывать смену режимов движения. Это проявляется и в том, что в фазовом пространстве такой системы с числом степеней свободы $N \geq 1.5$ при определенном наборе параметров межчастичного взаимодействия имеются области, в которых движение является по существу хаотическим. Однако не только динамическая модель оказывается сильно нелинейной. Подобный характер движения может проявляться и в статической нелинейной многочастичной системе. Цель работы – исследовать влияние внешнего поля, задаваемого межатомным трехъямным потенциалом, на равновесную структуру цепочки взаимодействующих атомов.

Методы. Использованы методы гамильтоновой механики.

Результаты. Получены и проанализированы аналитические выражения, определяющие фазовый портрет равновесной структуры цепочки взаимодействующих атомов при различных значениях параметра потенциала межчастичного взаимодействия, в котором движется каждый атом цепочки. Построены фазовые портреты равновесной структуры системы в континуальном и дискретном представлениях уравнений равновесия при различных значениях параметра, характеризующего межчастичный потенциал, в котором движется каждый атом цепочки.

Выводы. Показано, что в зависимости от величины внешнего поля реализуется как периодическое, так и случайное, хаотическое расположение атомов цепочки.

Ключевые слова: трехъямный потенциал, цепочка, взаимодействие, атом, фазовый портрет, хаос, структура

• Поступила: 22.03.2024 • Доработана: 15.04.2024 • Принята к опубликованию: 27.09.2024

Для цитирования: Ожерелкова Л.М., Савин Е.С., Тишаева И.Р., Шевелев В.В. Структурные переходы в системах с трехминимумным потенциалом. *Russ. Technol. J.* 2024;12(6):91–101. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2024-12-6-91-101>

Прозрачность финансовой деятельности: Авторы не имеют финансовой заинтересованности в представленных материалах или методах.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

RESEARCH ARTICLE

Structural transitions in systems with a triple-well potential

Liliya M. Ozherelkova [@],
Evgeniy S. Savin,
Irina R. Tishaeva,
Valentin V. Shevelev

MIREA – Russian Technological University, 119454 Russia

[@] Corresponding author, e-mail: ozherelkova@mirea.ru

Abstract

Objectives. Recently studied phenomena in condensed matter physics have prompted new insights into the dynamic theory of crystals. The results of numerous experimental data demonstrate the impossibility of their explanation within the framework of linear models of the dynamics of many-particle systems, resulting in the necessity to account for nonlinear effects. Analyzing the dynamics of systems in condensed matter physics containing a sufficiently large number of particles shows that modes of motion can undergo changes depending on the potential of interparticle interaction. This is also reflected in the presence of domains with essentially chaotic phase space having a number of degrees of freedom $N \geq 1.5$ and a certain set of interparticle interaction parameters. However, it is not only the dynamic model that appears to be strongly nonlinear. A similar nature of motion can be also observed in a static nonlinear many-particle system. The paper aims to study the influence of the external field specified by the interatomic triple-well potential on the equilibrium structure of a chain of interacting atoms.

Methods. Methods of Hamiltonian mechanics are used.

Results. Analytical expressions are obtained and analyzed for determining the phase portrait of the equilibrium structure of a chain of interacting atoms for various values of the parameter characterizing the local potential of the field in which each atom of the chain moves. Phase portraits of the equilibrium structure of the system are constructed in continuous and discrete representations of the equilibrium equations for various values of the parameter characterizing the local potential of the field in which each atom of the chain moves.

Conclusions. It is shown that both periodic and random chaotic arrangements of atoms are implemented depending on the magnitude of the external field.

Keywords: triple-well potential, chain, interaction, atom, phase portrait, chaos, structure

• Submitted: 22.03.2024 • Revised: 15.04.2024 • Accepted: 27.09.2024

For citation: Ozherelkova L.M., Savin E.S., Tishaeva I.R., Shevelev V.V. Structural transitions in systems with a triple-well potential. *Russ. Technol. J.* 2024;12(6):91–101. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2024-12-6-91-101>**Financial disclosure:** The authors have no financial or proprietary interest in any material or method mentioned.

The authors declare no conflicts of interest.

ВВЕДЕНИЕ

Явления, изучаемые в последнее время физической конденсированного состояния, привели к новым взглядам на проблемы динамической теории кристаллов [1, 2]. Для объяснения многочисленных экспериментальных данных [3, 4] стало необходимым учитывать существенно нелинейные эффекты. Однако не только динамическая модель является сильно нелинейной. Оказалось [4, 5], что тип кристаллической решетки даже при абсолютной температуре $T = 0$ К зависит от нелинейных свойств потенциала взаимодействия атомов кристалла.

Анализ динамики систем, состоящих из достаточно большого числа частиц, показывает [1–5], что в зависимости от характера и величины взаимодействий между частицами система может проходить через ряд бифуркаций, проявляющихся в смене различных видов движения. Это проявляется и в том, что в фазовом пространстве такой системы с числом степеней свободы $N \geq 1.5$ при определенном наборе параметров потенциала межчастичного взаимодействия имеются области, в которых движение является по существу хаотическим [6–12].

Сказанное означает, что в этих областях характер детерминированного уравнения динамики движения системы такой, что его трудно отличить от случайного процесса. Кроме того, наличие таких областей означает, что при изменении параметров потенциала межчастичного взаимодействия или начальных условий в системе могут реализоваться либо детерминированные, либо стохастические траектории движения. Эти эффекты являются проявлением нелинейности потенциала межчастичного взаимодействия.

Явление бифуркации возможно и в статической системе с нелинейным потенциалом межчастичного взаимодействия. Наличие таких бифуркаций в этом случае будет означать наличие структурных переходов разной степени регулярности, вплоть до хаотической.

Авторами [3, 5] в основном проводились исследования возможных видов одномерных структур и переходов между ними. Выделение одномерных систем по отношению к неодномерным существенно упрощает решение задачи о равновесии атомных цепочек, поскольку расположение атомов вдоль одной координаты позволяет придать этой координате смысл «времени». Модель атомной одномерной

цепочки в периодическом поле рассмотрена в [13, 14], модель «и – 4» – в [13]. В данной работе рассматривается модель «и – 6».

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

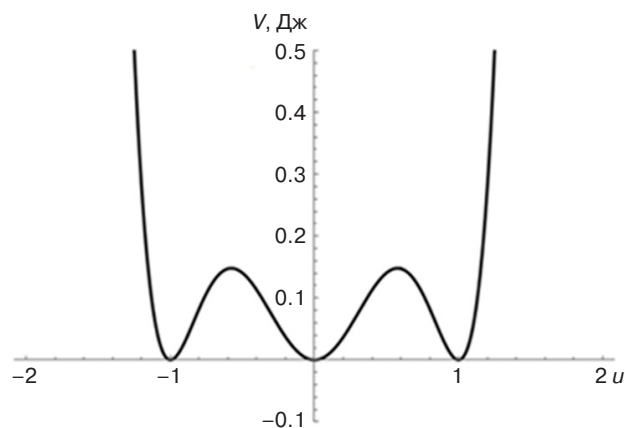
Рассмотрим, следуя [4], одномерную цепочку атомов, которые взаимодействуют с ближайшими к ним соседями и находятся во внешнем поле $V(u_n)$, обусловленном взаимодействием атома с номером n цепочки с атомами решетки, его окружающими. Функция Гамильтона (гамильтониан) такой цепочки (системы) имеет вид (масса атома принята равной единице):

$$H = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2} p_n^2 + \frac{1}{2} \chi a^2 (u_n - u_{n-1} - 1)^2 + V(u_n) \right]. \quad (1)$$

Здесь u_n – смещение n -го атома в единицах межатомного расстояния a в невозмущенной цепочке, т.к. при $V = 0$ условие минимума потенциальной энергии дает $u_{n+1} - u_n = 1$ для всех номеров n ; $p_n = a\dot{u}_n$, χ – постоянная силового взаимодействия атомов цепочки; $V(u_n)$ – внешнее потенциальное поле, в котором движется n -й атом. Зададим потенциальное поле $V(u_n)$ в виде следующей функции (модель «и – 6»):

$$V(u) = \varepsilon_0 u^2 (u^2 - 1)^2, \quad (2)$$

где $|\varepsilon_0|$ – величина потенциального барьера. При $\varepsilon_0 > 0$ функция имеет три минимума и два максимума (рис. 1), при $\varepsilon_0 < 0$ – два минимума и три максимума (рис. 2).

**Рис. 1.** Потенциал $V(u)$ при $\varepsilon_0 > 0$

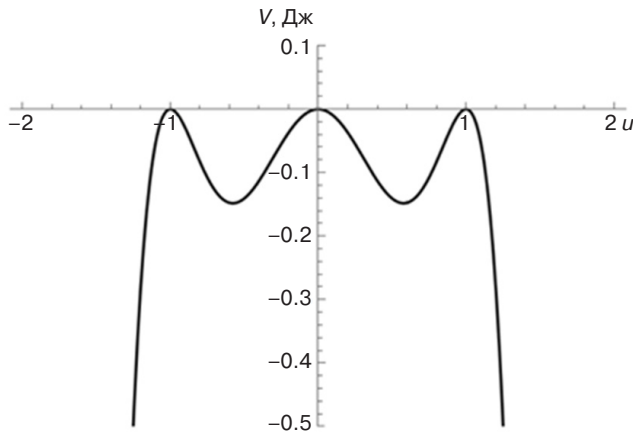


Рис. 2. Потенциал $V(u)$ при $\varepsilon_0 < 0$

АНАЛИЗ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ. КОНТИНУАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

1. Особые точки на фазовой плоскости.

Относительная величина потенциального барьера $|\varepsilon_0|$ и энергия межатомной связи $\approx \chi a^2$ между атомами в соседних узлах цепочки являются существенными параметрами, влияющими на свойства цепочки с гамильтонианом (1) с внешним потенциалом (2). Если выполняется неравенство $\chi a^2 \gg |\varepsilon_0|$, то равновесное положение атомов цепочки будет иметь форму пространственной периодической волны. В случае $\chi a^2 \ll |\varepsilon_0|$ связи между частицами становятся малосущественными, и цепочка образует «газ» частиц, которые хаотически разбросаны по потенциальным ямам внешнего поля.

Все возможные конфигурации цепочки являются решениями уравнения ($\partial H / \partial u_n = 0$):

$$\chi a^2 (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) = \frac{dV}{du_n}. \quad (3)$$

Выражение (3) является разностным уравнением. В континуальном приближении, когда величины смещения атомов u_n слабо зависят от индекса n , имеем

$$u_{n+1} = u_n + \frac{du}{dx} + \frac{1}{2!} \cdot \frac{d^2u}{dx^2} + \dots,$$

$$u_{n-1} = u_n - \frac{du}{dx} + \frac{1}{2!} \cdot \frac{d^2u}{dx^2} + \dots,$$

и уравнение, описывающее равновесную форму цепочки, будет иметь вид:

$$\chi a^2 \frac{d^2u}{dx^2} = \frac{dV}{du}. \quad (4)$$

Для функции $W = -V$ формула (4) есть уравнение движения нелинейного осциллятора, если под временем понимать переменную x . Оно эквивалентно системе двух уравнений 1-го порядка:

$$\begin{cases} \chi a^2 \frac{du}{dx} = v, \\ \frac{dv}{dx} = \varepsilon_0 (6u^5 - 8u^3 + 2u). \end{cases}$$

Особые точки на фазовой плоскости ($u, du/dx$) определяются условиями ($v = 0, dv/dx = 0$), т.е. системой уравнений

$$\begin{cases} v = 0, \\ 6u^5 - 8u^3 + 2u = 0. \end{cases}$$

Эта система определяет 5 особых точек: $u = 0, u = \pm 1/\sqrt{3}, u = \pm 1$. При $\varepsilon_0 > 0$ точки $u = 0, \pm 1$ являются седловыми, а точки $u = \pm 1/\sqrt{3}$ – центрами. Наоборот, при $\varepsilon_0 < 0$ точки $u = 0, \pm 1$ – центры, а $u = \pm 1/\sqrt{3}$ – седла.

2. Фазовые траектории движения. Интегрируя уравнение (4) один раз, получим уравнение, определяющее фазовые траектории на плоскости ($u, du/dx$):

$$\sqrt{\frac{\chi a^2}{2}} \cdot \frac{du}{dx} = \pm \sqrt{\varepsilon_0 (u^6 - 2u^4 + u^2) + E}, \quad (5)$$

где E – постоянная интегрирования. Траектории движения системы (фазовый портрет) существенно зависят от знака параметра ε_0 . Поэтому рассмотрим два случая.

2.1. Параметр $\varepsilon_0 > 0$. Как следует из (5), при $\varepsilon_0 > 0$ в потенциальной яме конечной глубины периодические колебания атомов (периодические структуры) существуют только при условии $-4\varepsilon_0/27 \leq E \leq 0$.

В промежутке $E > 0$ периодические колебания и соответствующие им периодические (упорядоченные) структуры цепочки невозможны.

Фазовые траектории движения системы на фазовой плоскости, построенные на основе уравнения (5), для случая $\varepsilon_0 > 0$ имеют вид, представленный на рис. 3. Как видно из рисунка, фазовый портрет системы содержит 5 основных элементов: особые точки типа «центр» при $u = \pm 1/\sqrt{3}$ и три седловые особые точки $u = 0, \pm 1$. Выделенная траектория движения, которая выходит из одного седла и входит в другое, является сепаратрисой. Эта кривая разделяет области фазовой плоскости с существенно разным характером движения: сепаратриса отделяет периодические движения цепочки от аperiodических, т.е. упорядоченные структуры от неупорядоченных.

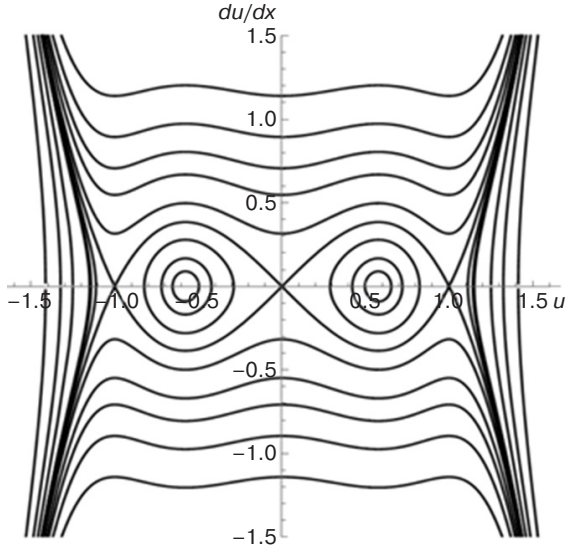


Рис. 3. Фазовый портрет системы при $\varepsilon_0 > 0$

2.2. Параметр $\varepsilon_0 < 0$. На рис. 4 представлены фазовые траектории движения системы на фазовой плоскости в случае, когда $\varepsilon_0 < 0$. Как видно из рисунка, все фазовые траектории в этом случае являются замкнутыми, что отвечает колебательному движению атомов цепочки и соответствует существованию ее периодических структур. При этом сепаратрисы имеют вид петель, которые начинаются и заканчиваются в одном и том же седле и выделяют траектории, которые соответствуют колебаниям цепочки, имеющим разный характер: колебания малой амплитуды возле минимумов $u = 0, \pm 1$ отделены сепаратрисой от колебаний с большой амплитудой около начала координат.

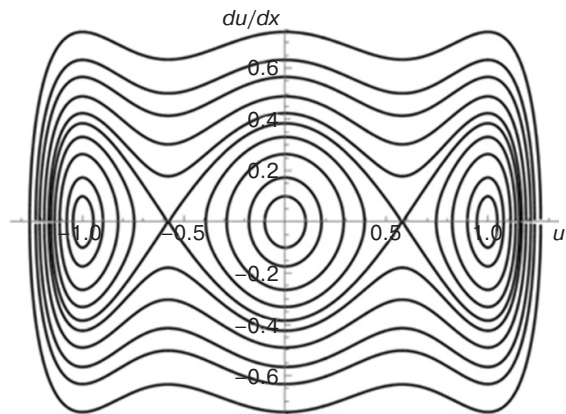


Рис. 4. Фазовый портрет системы при $\varepsilon_0 < 0$

3. Анализ решений уравнения (5). Далее рассмотрим отдельно решения уравнения (5) в зависимости от знака параметра ε_0 в выражении (2).

3.1. Параметр $\varepsilon_0 > 0$. В этом случае после интегрирования уравнения (5) получим, обозначив $E_0 = E/\varepsilon_0$,

$$\int_{u_1}^{u_2} \frac{du}{\sqrt{u^6 - 2u^4 + u^2 + E_0}} = \int_{u_1}^{u_2} \frac{du}{\sqrt{P_6(u, E_0)}} = \pm \int_{x_0}^x \frac{\sqrt{2\varepsilon_0}}{\sqrt{\chi a^2}} dx. \quad (6)$$

Здесь величина $P_6(u, E_0) = u^6 - 2u^4 + u^2 + E_0$. Пределы интегрирования u_1, u_2 должны удовлетворять условию $P_6(u, E_0) > 0$. Введем новую переменную интегрирования соотношением $u^2 = y$ и далее преобразуем выражение (6) к виду:

$$\int_{y_1}^{y_2} \frac{dy}{\sqrt{P_4(y, E_0)}} = \pm 2 \sqrt{\frac{2\varepsilon_0}{\chi a^2}} (x - x_0). \quad (7)$$

Здесь $P_4(y, E_0) = y^4 - 2y^3 + y^2 + E_0y$. На рис. 5 представлены графики функции $P_4(y, E_0)$ для двух различных значений E_0 .

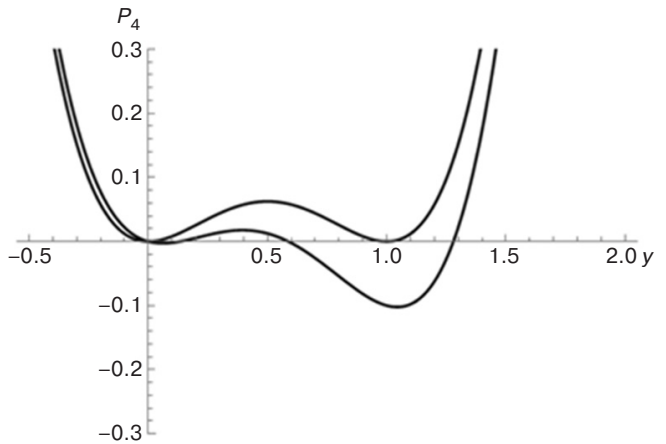


Рис. 5. Графики функции $P_4(y, E_0)$ при $\varepsilon_0 > 0$

Исследуем все возможные случаи представления полинома $P_4(y, E_0)$ в виде произведения сомножителей. При $E < -4\varepsilon_0/27$ полином $P_4(y, E_0)$ имеет два действительных и два комплексно-сопряженных корня. Тогда с учетом этого уравнение (7) примет вид:

$$\int_{C_1}^y \frac{dy}{\sqrt{y(y - C_1)[(y - \alpha)^2 + \beta^2]}} = \pm 2 \sqrt{\frac{2\varepsilon_0}{\chi a^2}} (x - x_0). \quad (8)$$

Здесь C_1 – действительный корень полинома $P_4(y, E_0)$, второй действительный корень $y = 0$, комплексные корни $\alpha \pm i\beta$. Интеграл в левой части уравнения (8) выражается через эллиптические функции Якоби [15, 16]:

$$\int_{C_1}^y \frac{dy}{\sqrt{y(y-C_1)[(y-\alpha)^2+\beta^2]}} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{pq}} F \left(2 \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{q(y-C_1)}{py}}; \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(p+q)^2+C_1^2}{pq}} \right). \quad (9)$$

Здесь $p^2 = (C_1 - \alpha)^2 + \beta^2$, $q^2 = (2C_1 - \alpha)^2 + \beta^2$.

Введя новую переменную $z = 2 \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 pq}{\chi a^2}} (x - x_0)$,
получим из уравнений (8), (9)

$$z = \pm F(\gamma, k). \quad (10)$$

$$\text{Здесь } \gamma = 2 \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{q(y-C_1)}{py}}, \quad k = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(p+q)^2+C_1^2}{pq}},$$

а $F(\gamma, k)$ – эллиптический интеграл 1-го рода.

Из выражения (10) следует, что

$$\operatorname{sn}(z, k) = \sin(\gamma) = \sin \left(2 \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{q(y-C_1)}{py}} \right) =$$

$$= 2 \sqrt{\frac{q(y-C_1)}{py}} \left[1 + \frac{q(y-C_1)}{py} \right]^{-1/2}. \quad (11)$$

Тогда

$$y = \frac{C_1 q \operatorname{sn}^2(z, k)}{q \operatorname{sn}^2(z, k) - p(1 \pm \operatorname{cn}(z, k))^2}. \quad (12)$$

Здесь $\operatorname{sn}(z, k)$ и $\operatorname{cn}(z, k)$ – соответственно эллиптические синус и косинус.

Функция y , определяемая уравнением (12), есть четная функция с периодом $T = 4K(k)/\delta$, где $K(k)$ – полный эллиптический интеграл 1-го рода, $\delta = 8|\varepsilon_0|pq/(\chi a^2)$. Следовательно,

$$u = \pm \frac{\operatorname{sn}(z, k) \sqrt{\alpha q}}{\sqrt{q \operatorname{sn}^2(z, k) - p(1 \pm \operatorname{cn}(z, k))^2}}. \quad (13)$$

В области $-4/27 \leq E_0 \leq 0$ полином $P_4(y, E_0)$ имеет 4 действительных корня $C_1 > C_2 > C_3 > C_4 = 0$. Корни C_1, C_2, C_3, C_4 должны удовлетворять следующим условиям:

$$\begin{cases} C_1 + C_2 + C_3 + C_4 = -2, \\ C_1 C_2 + C_3 C_4 + (C_1 + C_2)(C_3 + C_4) = -1, \\ C_1 C_2 (C_3 + C_4) + C_3 C_4 (C_1 + C_2) = E_0, \\ -C_1 C_2 C_3 C_4 = 0. \end{cases}$$

С учетом расположения корней C_1, C_2, C_3, C_4 на действительной оси полином $P_4(y, E_0) > 0$ в интервалах $y \in (C_3, C_2)$ и $y \in (C_1, \infty)$.

На интервале $y \in (C_3, C_2)$ интеграл в левой части уравнения (7) имеет вид:

$$\int_{C_3}^y \frac{dy}{\sqrt{(C_1-y)(C_2-y)(y-C_3)y}} = \frac{2F(\gamma, q)}{\sqrt{(C_1-C_3)C_2}}. \quad (14)$$

$$\text{Здесь } \gamma = \arcsin \sqrt{\frac{C_2(y-C_3)}{(C_2-C_3)y}}, \quad q = \sqrt{\frac{(C_2-C_3)C_1}{(C_1-C_3)C_2}}.$$

Обозначим

$$z = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0(C_1-C_3)C_2}{\chi a^2}} (x - x_0). \quad (15)$$

Тогда из (14), (15) получим, что $z = \pm F(\gamma, q)$ и, таким образом,

$$\operatorname{sn}(z, q) = \sin \gamma = \sqrt{\frac{C_2(y-C_3)}{(C_2-C_3)y}}.$$

Следовательно,

$$u = \pm \left[\frac{C_2 C_3}{C_2 - (C_2 - C_3) \operatorname{sn}^2(z, q)} \right]^{1/2}. \quad (16)$$

Как и выше, функция u является четной функцией с периодом $T = 4K(k)/\delta$, где

$$\delta = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0(C_1-C_3)C_2}{\chi a^2}}.$$

Если положить в (16) $C_1 = C_2$, то параметр $q = 1$ и решение (16) является солитонным решением, имеющим вид:

$$u = \pm \sqrt{\frac{C_2 C_3}{C_2 - (C_2 - C_3) \operatorname{th}^2 z}}. \quad (17)$$

В интервале значений $y > C_1$ многочлен $P_4(y, E_0) > 0$. Подставляя в (8) нужные пределы интегрирования, находим периодические решения, существующие при $E_0 > 0$. Имеем

$$\int_{C_1}^y \frac{dy}{\sqrt{(y-C_1)(y-C_2)(y-C_3)y}} =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{(C_1-C_3)C_2}} F(\varphi, k) = \pm 2 \sqrt{\frac{2\varepsilon_0}{\chi a^2}} (x - x_0), \quad (18)$$

$$\text{где } \varphi = \arcsin \sqrt{\frac{C_2(y-C_1)}{C_1(y-C_2)}}, \quad k = \sqrt{\frac{(C_2-C_3)C_1}{(C_1-C_3)C_2}}.$$

$$\text{Пусть } z = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0(C_1 - C_3)C_2}{\chi a^2}}(x - x_0).$$

Тогда $z = \pm F(\varphi, k)$ и, следовательно,

$$\operatorname{sn}(z, k) = \sin \varphi = \sqrt{\frac{C_2(y - C_1)}{C_1(y - C_2)}}. \quad (19)$$

Учитывая, что $u = \pm y^{1/2}$, получим

$$u = \pm \left[\frac{C_1 C_2 (1 - \operatorname{sn}^2(z, k))}{C_2 - C_1 \operatorname{sn}^2(z, k)} \right]^{1/2}. \quad (20)$$

При $C_1 = C_2$ ($k = 1$) из (20) имеем солитонное решение колокообразного вида:

$$u = \pm \left[\frac{C_1 C_2 (1 - \operatorname{th}^2(z))}{C_2 - C_1 \operatorname{th}^2(z)} \right]^{1/2}.$$

При $z = 0$ u имеет вид $u = \pm C_1^{1/2}$, а при $z \rightarrow \pm\infty$ $u = 0$.

3.2 Параметр $\varepsilon_0 < 0$. В случае $\varepsilon_0 < 0$ уравнение (5) имеет вид:

$$\sqrt{\frac{\chi a^2}{2|\varepsilon_0|}} \frac{du}{dx} = \pm \sqrt{-u^6 + 2u^4 - u^2 + E_0}, \quad (21)$$

где $E_0 = E/|\varepsilon_0|$.

На фазовой плоскости $(u, du/dx)$ «осциллятора» имеются 3 точки устойчивого положения равновесия $u = 0, \pm 1$ и 2 точки $u = \pm 1/\sqrt{3}$, отвечающие неустойчивым положениям.

Интегрируем уравнение (21):

$$\begin{aligned} \int_{u_1}^{u_2} \frac{du}{\sqrt{-u^6 + 2u^4 - u^2 + E_0}} &= \\ &= \int_{u_1}^{u_2} \frac{du}{\sqrt{P_6(u, E_0)}} = \pm \sqrt{\frac{2|\varepsilon_0|}{\chi a^2}} \int_{x_0}^x dx, \end{aligned} \quad (22)$$

где $P_6(u, E_0) = -u^6 + 2u^4 - u^2 + E_0$.

Введем новую переменную интегрирования $u^2 = y$, $du = dy/2\sqrt{y}$. Тогда (22) примет вид

$$\int_{u_3}^{u_4} \frac{dy}{\sqrt{P_4(y, E_0)}} = \pm 2\sqrt{\frac{2|\varepsilon_0|}{\chi a^2}}(x - x_0). \quad (23)$$

Здесь $P_4(y, E_0) = -y^4 + 2y^3 - y^2 + E_0 y$. На рис. 6 представлены графики функции $P_4(y, E_0)$ при двух различных значениях E_0 .

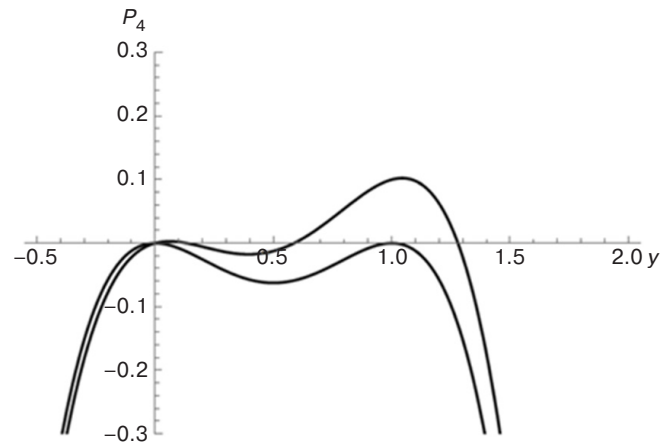


Рис. 6. Графики функции $P_4(y, E_0)$ при $\varepsilon_0 < 0$

Также, как и ранее, исследуем различные случаи разложения многочлена $P_4(y, E_0)$ на множители. В том случае, когда у многочлена $P_4(y, E_0)$ имеется два действительных $y = 0, y = C_1$ и два комплексно-сопряженных корня $y = \alpha \pm i\beta$, выражение (23) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} \int_0^y \frac{dy}{\sqrt{y(C_1 - y)[(y - \alpha)^2 + \beta^2]}} &= \\ &= \pm 2\sqrt{\frac{2|\varepsilon_0|}{\chi a^2}}(x - x_0), \quad 0 < y < C_1. \end{aligned} \quad (24)$$

Так как интеграл в левой части (24) есть эллиптическая функция Якоби, то это уравнение можно представить в виде

$$z = \pm F(\gamma, k), \quad (25)$$

$$\text{где } z = 2\sqrt{\frac{2|\varepsilon_0|}{\chi a^2}}pq(x - x_0), \quad \gamma = 2 \operatorname{arccctg} \sqrt{\frac{q(C_1 - y)}{py}},$$

$$k = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-(p - q)^2 + C_1^2}{pq}}, \quad q^2 = \alpha^2 + \beta^2, \quad p^2 = (\alpha - C_1)^2 + \beta^2,$$

$F(\gamma, k)$ – эллиптическая функция Якоби.

Из уравнения (25) следует

$$\begin{aligned} \operatorname{sn}(z, k) = \sin \gamma &= \sin \left(2 \operatorname{arccctg} \sqrt{\frac{q(C_1 - y)}{py}} \right) = \\ &= \frac{\sqrt{qpy(C_1 - y)}}{py + q(C_1 - y)}. \end{aligned}$$

Отсюда получим, что $y = u^2$ и

$$y = \frac{qC_1 \operatorname{sn}^2(z, k)}{p(1 \pm \operatorname{cn}(z, k))^2 + q \operatorname{sn}^2(z, k)}. \quad (26)$$

Функция y есть четная периодическая функция с периодом $T = 4K(k)/\delta$. При $x = x_0$ эта функция обращается в ноль. Таким образом

$$u = \pm \frac{\operatorname{sn}(z, k) \sqrt{qC_1}}{\sqrt{p(1 \pm \operatorname{cn}(z, k))^2 + q \operatorname{sn}^2(z, k)}}. \quad (27)$$

Из (27) следует, что функция u может быть как четной с периодом $T = 4K(k)/\delta$, так и нечетной с периодом $T = 8K(k)/\delta$, $\delta = 8|\varepsilon_0|pq/(\chi a^2)$.

Рассмотрим теперь случай, когда все корни C_1, C_2, C_3, C_4 многочлена $P_4(y, E_0)$ действительные, причем $C_1 > C_2 > C_3 > C_4 = 0$. Тогда интеграл в левой части (23) преобразуется к виду при условии $0 < y < C_3$:

$$\begin{aligned} \int_0^y \frac{dy}{\sqrt{(C_1 - y)(C_2 - y)(C_3 - y)y}} = \\ = \frac{2}{\sqrt{(C_1 - C_3)C_2}} F(\beta, r) = \pm 2 \sqrt{\frac{2|\varepsilon_0|}{\chi a^2}} (x - x_0). \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь $\beta = \arcsin \sqrt{\frac{(C_1 - C_3)y}{(C_1 - y)C_3}}$, $r = \sqrt{\frac{C_3(C_1 - C_2)}{C_2(C_1 - C_3)}}$, $0 < y < C_3$.

Из выражения (28) следует:

$$u = \pm \frac{\sqrt{C_1 C_3} \operatorname{sn}(z, r)}{\sqrt{(C_1 - C_3) + C_3 \operatorname{sn}^2(z, r)}}. \quad (29)$$

Здесь $z = \sqrt{\frac{2|\varepsilon_0|}{\chi a^2}} (C_1 - C_3) C_2 (x - x_0)$.

Уравнение (29) имеет солитонное решение в случае, когда $C_2 = C_3$, при этом параметр $r = 1$. Это решение имеет вид

$$u = \pm \frac{\sqrt{C_1 C_3} \operatorname{th} z}{\sqrt{C_1 - C_3 + C_3 \operatorname{th}^2 z}}. \quad (30)$$

Заметим, что $u = 0$ при $z = 0$, а при $z \rightarrow \pm\infty$ $u = \pm\sqrt{C_3}$.

Полином $P_4(y, E_0)$ положителен также в интервале $C_2 < y < C_1$.

Подставляя нужные пределы интегрирования, из (23) находим:

$$\begin{aligned} \int_{C_2}^y \frac{dy}{\sqrt{y(C_1 - y)(y - C_2)(y - C_3)}} = \\ = \frac{2}{\sqrt{(C_1 - C_3)C_2}} F(\lambda, r) = \pm \sqrt{\frac{2|\varepsilon_0|}{\chi a^2}} (x - x_0), \end{aligned} \quad (31)$$

где $\lambda = \arcsin \sqrt{\frac{(C_1 - C_3)(y - C_2)}{(C_1 - C_2)(y - C_3)}}$, $r = \sqrt{\frac{C_3(C_1 - C_2)}{C_2(C_1 - C_3)}}$.

Учитывая (31), получим

$$u = \pm \sqrt{\frac{C_3(C_1 - C_2) \operatorname{sn}^2(z, r) - C_2(C_1 - C_3)}{(C_1 - C_2) \operatorname{sn}^2(z, r) - (C_1 - C_3)}}, \quad (32)$$

где $z = \sqrt{\frac{2|\varepsilon_0|}{\chi a^2}} (C_1 - C_3) C_2 (x - x_0)$.

Таким образом, полученные в континуальном приближении (при условиях слабого внешнего поля) результаты свидетельствуют о том, что независимо от знака ε_0 в окрестностях точек устойчивого положения фазовые кривые замкнуты и имеют вид слегка деформированных эллипсов. Каждой такой кривой соответствует равновесное положение цепочки в форме пространственной периодической волны. Сепаратрисам, соединяющим точки неустойчивого положения и ограничивающим область замкнутых кривых, отвечает равновесная форма в виде уединенной волны, имеющей колоколообразную форму.

АНАЛИЗ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ. ДИСКРЕТНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

При достаточно большом значении потенциала внешнего поля функцию u_n нельзя считать слабозависящей от n , поэтому необходимо вернуться к разностным уравнениям.

Уравнение (3) можно представить в виде отображения, если ввести переменную $I_n = (u_n - u_{n-1})$. Тогда уравнение (3) переходит в универсальное отображение [3]:

$$\begin{cases} I_{n+1} = I_n + \frac{dV_0}{du_n}, \\ u_{n+1} = u_n + I_{n+1}, \end{cases} \quad (33)$$

где $V_0 = V/(\chi a^2)$.

Отображение (33) имеет периодические и хаотические решения, которые определяют соответствующие

расположения атомов в цепочке, т.е. ее структуру. Таким образом, изучение равновесных форм цепочки сводится к исследованию последовательностей точек $\{u_n, I_n\}$, нанесенных на плоскость. В зависимости от начальных значений (u_0, I_0) эта последовательность либо регулярно укладывается в замкнутые линии, либо оказывается хаотически разбросанной в некоторой области на координатной плоскости.

Результаты численного решения системы уравнений (33) с функцией V в виде (2) представлены на рис. 7 и 8 как фазовые портреты системы при различных значениях параметра $\varepsilon'_0 = \varepsilon_0/(\chi a^2)$.

При $\varepsilon'_0 = 0$ решение системы (33) в координатах (u, I) при любых начальных значениях (u_0, I_0) представляет собой прямую линию, параллельную оси u . При достаточно малых ε'_0 (рис. 7) основную часть фазового пространства занимает последовательность точек, укладывающаяся в замкнутые кривые.

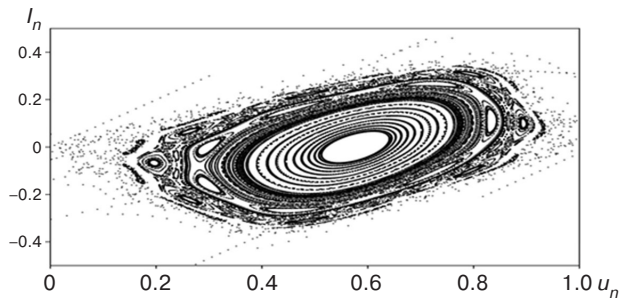


Рис. 7. Фазовый портрет системы при $\varepsilon'_0 = 0.4$

Вместе с тем, в малой части фазового пространства появляется беспорядочное распределение последовательных пар (u_n, I_n) на плоскости, демонстрирующее явление хаоса для модели (33). Эти пары занимают в фазовом пространстве узкие стохастические слои, отделенные друг от друга инвариантными кривыми. Отдельные области на фазовой плоскости не заняты точками стохастической траектории. В этих областях имеется конечная мера периодических траекторий, в центральных частях этих областей выполняются условия КАМ-теории (теории Колмогорова – Арнольда – Мезера) [13]. Это означает, что в случае малости ε'_0 стохастические слои не соединяются друг с другом. Это есть прямое следствие КАМ-теории [13] для числа степеней свободы $N \leq 2$.

Для $\varepsilon'_0 \ll 1$, следуя [3], можно получить оценку ширины стохастического слоя δh :

$$\delta h \approx 2(2\pi)^4 e^{-\frac{\pi}{\sqrt{\varepsilon'_0}}}. \quad (34)$$

Из (34) следует, что при любых сколь угодно малых возмущениях появляется экспоненциально малый стохастический слой, который можно

трактовать как зародыш структурного хаоса в расположении атомов цепочки.

Увеличение значений параметра ε'_0 ведет к росту ширины стохастического слоя, что, в свою очередь, ведет к разрушению КАМ-кривых и слиянию стохастических слоев и далее – к образованию стохастического моря, содержащего островки устойчивости.

На рис. 8 представлен фазовый портрет системы при $\varepsilon'_0 = 0.7$.

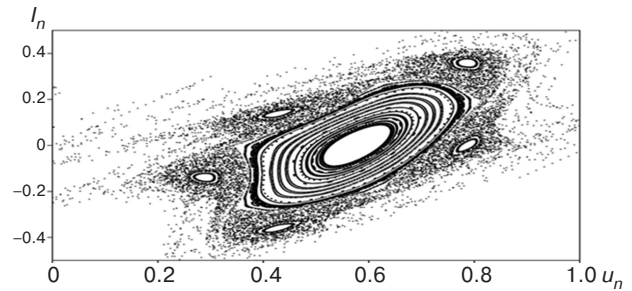


Рис. 8. Фазовый портрет системы при $\varepsilon'_0 = 0.7$

Как видно из рис. 8, наиболее крупным объектом фазового портрета является ячейка сепаратрисы с седлом $u = \pm 1/\sqrt{3}$, которая разрушена, а на ее месте образовался стохастический структурный слой. В области, ограниченной этим главным слоем, содержится семейство вложенных друг в друга инвариантных кривых, которые охватывают точку $I = 0$. Вне области, ограниченной главным стохастическим слоем, располагается группа сепаратрисных ячеек, содержащих более узкие стохастические слои. Вне ячеек расположены инвариантные кривые. Таким образом, фазовый портрет системы состоит из бесконечного числа чередующихся инвариантных кривых и стохастических слоев. При $\varepsilon'_0 \sim 1$ наблюдается слияние стохастических слоев, образование общего стохастического моря, что означает переход к образованию хаотичной структуры цепочки.

При $|\varepsilon'_0| \gg 1$ почти вся область фазового пространства становится областью стохастического движения. Исключения составляют островки устойчивости, размер которых при $|\varepsilon'_0| \gg 1$ имеет порядок $1/|\varepsilon'_0|$. Они расположены в окрестности эллиптических точек (точек устойчивого положения равновесия) отображения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано, что в континуальном приближении в условиях малого внешнего поля, независимо от знака ε_0 , в окрестностях точек устойчивого положения фазовые кривые замкнуты и имеют вид слегка деформированных эллипсов. Каждой такой кривой соответствует равновесное положение цепочки в форме пространственной периодической волны.

Сепаратрисам, соединяющим точки неустойчивого положения и ограничивающим область замкнутых кривых, отвечает равновесная форма цепочки в виде уединенной волны, имеющей колоколообразную форму.

Результаты численного решения системы уравнений равновесия также показывают, что в зависимости от величины внешнего поля реализуется как

периодическое, так и случайное, хаотическое расположение атомов цепочки.

Вклад авторов. Все авторы в равной степени внесли свой вклад в исследовательскую работу.

Authors' contribution. All authors equally contributed to the research work.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Глик Д. *Хаос. Создание новой науки*: пер. с англ. М.: АСТ: Corpus; 2022. 432 с. ISBN 978-5-17-138645-0
2. Гринченко В.Т., Мацыпура В.Т., Снарский А.А. *Введение в нелинейную динамику: Хаос и фракталы*. М.: ЛЕНАНД; 2021. 280 с. ISBN 978-5-9710-6410-7
3. Заславский Г.М. *Физика хаоса в гамильтоновых системах*. Москва, Ижевск: Институт компьютерных исследований; 2004. 286 с. ISBN 5-93972-342-X
4. Ахмадулина Э.Н., Савин Е.С. Колебание протона в трех-минимумном потенциале. *Тонкие химические технологии (Вестник МИТХТ им. М.В. Ломоносова)*. 2012;7(6):88–91. URL: <https://www.elibrary.ru/pnmfxv>
5. Рагушина М.Д., Савин Е.С. Динамика систем, допускающих структурные фазовые переходы. *Тонкие химические технологии*. 2016;11(2):81–85. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2016-11-2-81-85>, URL: <https://www.elibrary.ru/tugqvj>
6. Ivanchenko M.V., Kozinov E.A., Volokitin V.D., Liniov A.V., Meyerov I.B., Denisov S.V. Classical bifurcation diagrams by quantum means. *Ann. Der Phys.* 2017;529(8):1600402. <https://doi.org/10.1002/andp.201600402>
7. Иванченко М.В. Диссипативный квантовый хаос. В сб.: *Нанoeлектроника, нанoфотоника и нелинейная физика: Сборник трудов XIV Всероссийской конференции молодых ученых*. Саратов: Техно-Декор; 2019. С. 96. URL: <https://www.elibrary.ru/pdgagn>
8. Arnold L., Boxier P. Stochastic bifurcation: instructive examples in dimension one. In: Pinsky M., Wihstutz V. (Eds.). *Diffusion Processes and Related Problems in Analysis. Volume II: Stochastic Flows. Volume 27: Progress in Probability*. Birkhäuser, Boston Basel Stuttgart; 1992. P. 241–255. https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0389-6_10
9. Юсипов И.И., Денисов С.В., Иванченко М.В. Бифуркации и хаос в открытых квантовых системах. *Известия вузов. Радиофизика*. 2023;66(1):71–85. URL: <https://www.elibrary.ru/zmnages>
10. Poot M., van der Zant H.S.J. Mechanical systems in the quantum regime. *Phys. Rep.* 2012;511(5):273–335. <http://doi.org/10.1016/j.physrep.2011.12.004>
11. Савин Е.С. Модель перехода полиэтилена в мезофазное состояние. *Высокомолекулярные соединения. Серия А*. 200;42(6):974–979. URL: <https://www.elibrary.ru/mpggvt>
12. Хакен Г. *Синергетика. Иерархия неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах*: пер. с англ. М.: Мир; 1985. 424 с.
13. Beloshapkin V.V., Tretyakov A.G., Zaslavsky G.M. Disorder of Particle Chains as a Dynamical Problem of Transition to Chaos: Analogy to Simulation Induced Chaos. *Communications on Pure and Applied Mathematics*. 1994;47(1):39–46. <https://doi.org/10.1002/cpa.3160470104>, URL: <https://www.elibrary.ru/zztesn>
14. Chernikov A.A., Natenzon M.Ya., Petrovichev B.A., Sagdeev R.Z., Zaslavsky G.M. Strong changing of adiabatic invariants, KAM-tori and Web-tori. *Phys. Lett. A*. 1988;129(7):377–380. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(88\)90006-0](https://doi.org/10.1016/0375-9601(88)90006-0)
15. Градштейн М.С., Рыжик И.М. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*. М.: Физматгиз; 1971. 1108 с.
16. Бейтмен Г., Эрдейи А. *Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции. Функции Ламе и Матье*: пер. с англ. М.: Наука; 1967. 300 с.

REFERENCES

1. Gleick J. *Khaos. Sozdanie novoi nauki (Chaos. Making a New Science)*. Transl. from Engl. Moscow: AST: Corpus; 2022. 432 p. (in Russ.). ISBN 978-5-17-138645-0
[Gleick J. *Chaos: Making a New Science*. Open Road Medea; 2011. 360 p.]
2. Grinchenko V.T., Matsypura V.T., Snarskii A.A. *Vvedenie v nelineinuyu dinamiku: Khaos i fraktaly (Introduction to Nonlinear Dynamics: Chaos and Fractals)*. M.: LENAND; 2021. 280 p. (in Russ.). ISBN 978-5-9710-6410-7
3. Zaslavskii G.M. *Fizika khaosa v gamil'tonovykh sistemakh (Physics of Chaos in Hamiltonian Systems)*. Moscow, Izhevsk: Institute of Computer Research; 2004. 286 p. (in Russ.). ISBN 5-93972-342-X
4. Akhmadulina E.N., Savin E.S. Proton oscillation in a three-minimum potential. *Fine Chem. Technol. (Vestnik MITHT)*. 2012;7(6):88–91 (in Russ.). Available from URL: <https://www.elibrary.ru/pnmfxv>
5. Ragushina M.D., Savin E.S. Dynamics of systems allowing structural phase transitions. *Fine Chem. Technol.* 2016;11(2): 81–85 (in Russ.). <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2016-11-2-81-85>, available from URL: <https://www.elibrary.ru/tugqvj>
6. Ivanchenko M.V., Kozinov E.A., Volokitin V.D., Liniov A.V., Meyerov I.B., Denisov S.V. Classical bifurcation diagrams by quantum means. *Ann. Der Phys.* 2017;529(8):1600402. <https://doi.org/10.1002/andp.201600402>
7. Ivanchenko M.V. Dissipative quantum chaos. In: *Nanoelectronics, Nanophotonics and Nonlinear Physics: Collection of proceedings of the 14th All-Russian Conference of Young Scientists*. Saratov: Techno-Décor; 2019. P. 96 (in Russ.). Available from URL: <https://www.elibrary.ru/pdgagn>

8. Arnold L., Boxier P. Stochastic bifurcation: instructive examples in dimension one. In: M. Pinsky and V. Wihstutz (Eds.). *Diffusion Processes and Related Problems in Analysis. Volume II: Stochastic Flows. Volume 27: Progress in Probability.* Birkhäuser, Boston Basel Stuttgart; 1992. P. 241–255. https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0389-6_10
9. Yusipov I.I., Denisov S.V., Ivanchenko M.V. Bifurcations and chaos in open quantum systems. *Radiophys. Quantum El.* 2023;66(1):63–76. <https://doi.org/10.1007/s11141-023-10276-6>, available from URL: <https://www.elibrary.ru/skhwmx> [Original Russian Text: Yusipov I.I., Denisov S.V., Ivanchenko M.V. Bifurcations and chaos in open quantum systems. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Radiofizika.* 2023;66(1):71–85 (in Russ.). Available from URL: <https://www.elibrary.ru/zmnages>]
10. Poot M., van der Zant H.S.J. Mechanical systems in the quantum regime. *Phys. Rep.* 2012;511(5):273–335. <http://doi.org/10.1016/j.physrep.2011.12.004>
11. Savin E.S. Model of the transition of polyethylene to a mesophase state. *Polym. Sci. Ser. A.* 2000;42(6):637–641. Available from URL: <https://www.elibrary.ru/lfybdp> [Original Russian Text: Savin E.S. Model of the transition of polyethylene to a mesophase state. *Vysokomole-kulyarnye Soedineniya. Seriya A.* 2000; 42(6):974–979 (in Russ.). Available from URL: <https://www.elibrary.ru/mpggtv>]
12. Haken H. *Sinergetika. Ierarkhiya neustoichivostei v samoorganizuyushchikhsya sistemakh i ustroistvakh (Synergetics. Hierarchy of Instabilities in Self-Organizing Systems and Devices).* Transl. from Engl. Moscow: Mir; 1985. 424 p. (in Russ.). [Haken H. *Synergetics: An Introduction.* Berlin: Springer Verlag; 1978. 394 p.]
13. Beloshapkin V.V., Tretyakov A.G., Zaslavsky G.M. Disorder of Particle Chains as a Dynamical Problem of Transition to Chaos: Analogy to Simulation Induced Chaos. *Communications on Pure and Applied Mathematics.* 1994;47(1):39–46. <https://doi.org/10.1002/cpa.3160470104>, available from URL: <https://www.elibrary.ru/zztesn>
14. Chernikov A.A., Natenzon M.Ya., Petrovichev B.A., Sagdeev R.Z., Zaslavsky G.M. Strong changing of adiabatic invariants, KAM-tori and Web-tori. *Phys. Lett. A.* 1988;129(7):377–380. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(88\)90006-0](https://doi.org/10.1016/0375-9601(88)90006-0)
15. Gradshteyn M.S., Ryzhik I.M. *Tablitsy integralov, summ, ryadov i proizvedenii (Tables of Integrals, Sums, Series and Products).* Moscow: Fizmatgiz; 1971. 1108 p. (in Russ.).
16. Bateman H., Erdelyi A. *Vysshie transtsendentnye funktsii. Ellipticheskie i avtomorfnye funktsii. Funktsii Lame i Mat'e (Higher transcendental functions. Elliptic and automorphic functions. Lamé and Mathieu functions).* Transl. from Engl. Moscow: Nauka; 1967. 300 p. (in Russ.). [Bateman H., Erdelyi A. *Higher Transcendental Functions.* V. 3. McGraw Hill; 1955. 312 p.]

Об авторах

Ожерелкова Лилия Мухарамовна, к.т.н., доцент, кафедра высшей и прикладной математики, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 86). E-mail: lilom@list.ru. Scopus Author ID 57212531310, <https://orcid.org/0009-0004-5680-5040>

Савин Евгений Степанович, к.ф.-м.н., доцент, кафедра высшей и прикладной математики, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 86). E-mail: savin@mirea.ru. Scopus Author ID 57214433156, <https://orcid.org/0009-0001-1402-5845>

Тишаева Ирина Романовна, к.т.н., доцент, кафедра высшей и прикладной математики, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 86). E-mail: irina.tishaeva@rambler.ru. Scopus Author ID 57212526831, <https://orcid.org/0000-0003-1866-6866>

Шевелев Валентин Владимирович, д.ф.-м.н., профессор, кафедра высшей и прикладной математики, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119571, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 86). E-mail: valeshevelev@yandex.ru. Scopus Author ID 7006985545, SPIN-код РИНЦ 3007-0334, <https://orcid.org/0000-0002-9285-5772>

About the authors

Liliya M. Ozherelkova, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Department of Higher and Applied Mathematics, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, MIREA – Russian Technological University (86, Vernadskogo pr., Moscow, 119571 Russia). E-mail: lilom@list.ru. Scopus Author ID 57212531310, <https://orcid.org/0009-0004-5680-5040>

Evgeniy S. Savin, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Department of Higher and Applied Mathematics, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, MIREA – Russian Technological University (86, Vernadskogo pr., Moscow, 119571 Russia). E-mail: savin@mirea.ru. Scopus Author ID 57214433156, <https://orcid.org/0009-0001-1402-5845>

Irina R. Tishaeva, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Department of Higher and Applied Mathematics, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, MIREA – Russian Technological University (86, Vernadskogo pr., Moscow, 119571 Russia). E-mail: irina.tishaeva@rambler.ru. Scopus Author ID 57212526831, <https://orcid.org/0000-0003-1866-6866>

Valentin V. Shevelev, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Department of Higher and Applied Mathematics, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, MIREA – Russian Technological University (86, Vernadskogo pr., Moscow, 119571 Russia). E-mail: valeshevelev@yandex.ru. Scopus Author ID 7006985545, RSCI SPIN-code 3007-0334, <https://orcid.org/0000-0002-9285-5772>