Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2020

© Тверской государственный университет, 2020

МЕРЫ ЭФФЕКТИВНОСТИ БАЗИСА В ЗАДАЧЕ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ

А.Н. Белов¹, В.В. Туровцев², Ю.Д. Орлов¹

¹ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

²ФГБОУ ВО «Тверской государственный медицинский университет»

170100, Россия, Тверь, ул. Советская, 4

Belov.AN@tversu.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.338

Аннотация: Рассмотрено понятие вариационного предела при численном решении торсионного уравнения Шрёдингера и определены значения энергий состояний и переходов между ними на вариационном пределе в зависимости от размера базиса. На большом числе модельных потенциалов показано, что количество достоверно вычисляемых уровней линейно зависит от числа базисных функций. Данное число уровней (номер наибольшего достоверного состояния) рекомендовано в качестве меры эффективности базиса. Для базиса плоских волн найдено, что коэффициент углового наклона линейной зависимости составляет $\approx 1,03$.

Ключевые слова: внутреннее вращение, торсионное уравнение Шрёдингера, базисные функции, эффективность базиса, плоские волны.

1. Введение

Современное развитие информационных технологий позволяет решать вычислительные задачи большой сложности и объема. Среди них – квантовомеханические расчеты структурных, энергетических, спектроскопических и термодинамических свойств сложных молекулярных соединений. В квантовомеханической модели разделения внутримолекулярных движений особое внимание уделяют внутреннему вращению, вносящему значительный вклад во все молекулярные свойства. Математически внутреннее вращение описывается торсионным уравнением Шрёдингера [1]

$$\left(-\frac{d}{d\varphi} F(\varphi) \frac{d}{d\varphi} + V(\varphi) \right) \Psi = E \Psi, \quad (1)$$

где $V(\varphi)$ – адиабатический потенциал, $F(\varphi)$ – структурная функция внутреннего вращения, φ – угол внутреннего вращения. Как правило, численное решение (1) ищется посредством решения задачи на собственные значения и собственные функции матрицы гамильтониана H_{nm} размером $M = 2N + 1$ при разложении амплитуды вероятности Ψ по базису $\{U_n\}$

$$\Psi = \sum_{n=-N}^{n=N} \psi_n U_n, \quad (2.1)$$

в качестве которого часто используется плоские волны [2]

$$\Psi = \sum_{n=-N}^{n=N} \psi_n e^{in\varphi}. \quad (2.2)$$

В большинстве расчетов авторы задают размер матрицы избыточно большим, чтобы гарантированно найти требуемую энергию E_m уровня m с нужной точностью. Обычно число строк (столбцов) M в матрице H_m значительно превышает индекс уровня m , так как увеличение M снижает ошибки представления Ψ и E_m [3]. Это продиктовано требованием достижения так называемого вариационного предела для энергии E_m , когда увеличение размера матрицы гамильтониана не влияет на величину E_m (при заранее определенном количестве значащих цифр).

Отметим, что базис плоских волн (2.2) не является единственно возможным. Например, есть обоснованные предложения по использованию базиса функций Матье [4], Морзевского базиса [5] и т.д. Казалось бы, для каждого такого случая можно привычными методами анализа оценить вычислительную сложность алгоритма расчета элементов матрицы H_m . Однако, с одной стороны, это в полной мере не будет характеризовать применение базиса, т.к. вариационный предел для E_m (т.е. индекс уровня $m_{\max}$) в каждом случае может быть различным. С другой стороны, использование матриц избыточного размера может привести к неоправданно завышенному числу «лишних» математических операций, и значит к росту вычислительных ресурсов, к объему памяти, накоплению ошибки при диагонализации и т.д. Таким образом, выбор оптимального размера матрицы гамильтониана в используемом базисе с учетом достижения вариационного предела для заданного числа уровней $m_{\max}$ представляется востребованной и актуальной задачей [6]. Особенно это важно при расчетах многомерных движений большой амплитуды, где число элементов матрицы H_m растет как M^{n+1} , где n есть размерность задачи.

Очевидно, что «истинное» (предельно точное) значение m -го уровня энергии при фиксированных функциях $V(\varphi)$ и $F(\varphi)$ достигается в бесконечномерном базисе, но на практике используют разложения с конечным числом слагаемых (2). Это обосновано тем, что в соответствии с вариационной процедурой Релея-Ритца [9-11], начиная с некоторого M , увеличение размерности базиса (а значит и размеров матрицы гамильтониана) не приводит к изменению в значащих разрядах выбранного E_m и нижележащих уровней, т.е. они достигают вариационного предела. Важно определить этот минимально необходимый размер базиса для гарантированного вычисления взятого m -го (или $m_{\max}$) энергетического уровня с требуемой точностью в количестве заданных

разрядов.

Удобно ввести параметр ε , численно характеризующий сходимость к вариационному пределу для m -го уровня энергии

$$\varepsilon_m^{M,k} = E_m^{(2(N+k)+1)} - E_m^{(2N+1)} \quad (3)$$

и являющийся разностью значений энергии при $M = 2N + 1$ и $2(N + k) + 1$ базисных функций. Целое число k показывает, на сколько строк (столбцов) происходит увеличение матрицы H_{mn} при изменении N (2).

Выполнение условия

$$\varepsilon_m^{M,k} \leq \varepsilon_0 \quad (4)$$

позволяет говорить о достижении вариационного предела для уровня m (а также нижележащих). Как правило, ε_0 выбирают порядка нескольких долей см^{-1} , что обосновано точностью экспериментальных данных.

Немногочисленные публикации [5, 9, 12, 13], где затрагивался вопрос о вариационном пределе, содержат результаты исследования сходимости отдельных уровней (в основном – нижних), без введения математического формализма. На основе (3) и (4) нами было рассмотрено достижение вариационного предела (значения $m_{\max}$) в зависимости от количества базисных функций на примере трех молекул – этанола, метакролеина ($\text{CH}_2 = \text{C}(\text{CH}_3) - \text{COH}$) и радикала $\text{FC}^* \text{HC}_3\text{H}_7$. Было установлено, что для этих трех молекул (как с симметричным строением, так и с отсутствием симметрии) индекс наибольшего достоверно вычисляемого уровня $m_{\max}$ линейно зависит от количества базовых функций (2). Причем, угол наклона полученных прямых был почти одинаковым для этих трех молекул. Указанные результаты выходят за рамки текущей публикации и будут нами опубликованы в ближайшее время. Однако, для подтверждения данного результата и его обобщения необходимо дополнительное исследование. Представляется целесообразным рассмотреть вместо отдельных молекул модельные (стандартные) примеры, где функции $V(\varphi)$ и $F(\varphi)$ в (1) изначально заданы в аналитическом виде, а их вид определяется рядом модельных параметров. Тогда, меняя их значения по отдельности, можно понять, как при этом будет меняться $m_{\max}$ и наклон выше указанной зависимости. Удобнее всего взять ряд модельных потенциалов внутреннего вращения из [7, 8], близких к потенциалам реальных соединений и позволяющих качественно оценивать поведение численного решения (1).

2. Вариационный предел для модельных потенциалов

Рассмотрим приближение к вариационному пределу при численном решении (1) в матричном виде в базисе плоских волн (2.1) для модельных потенциалов $V(\varphi)$. Здесь, как и в [7, 8], считаем, что структурная функция

является постоянной величиной (в см^{-1}) $F = 1$. Физически это соответствует фиксированному приведенному моменту инерции относительного вращения двух частей молекулы. В большинстве термодинамических и спектральных задач он с хорошей точностью считается постоянным.

Рис. 1. Модельный потенциал (5.1) с трехкратным барьером (а). Зависимость индекса m_{max} наибольшего уровня, достигшего вариационного предела, от размера базиса M при $\varepsilon = 0,1 \text{ см}^{-1}$ и $k = 5$ для потенциала (5.1). Результат аппроксимации линейной функцией $m_{\text{max}} = 1,015M - 11,057$ (б).

Рис. 2. Модельный потенциал (5.2). Зависимость индекса m_{max} наибольшего уровня, достигшего вариационного предела, от размера базиса M при $\varepsilon = 0,1 \text{ см}^{-1}$ и $k = 5$ для (5.2). Результат аппроксимации линейной функцией $m_{\text{max}} = 1,034M - 19,56$ (б).

Модельные потенциалы (см. рис. 1 а – 4 а) в первых четырех примерах взяты из [7]:

$$V = 50 + 50\cos(3\varphi), \quad (5.1)$$

$$V = 103,1 + 50\cos(2\varphi) + 100\cos(4\varphi), \quad (5.2)$$

$$V = 150 + 50\cos(2\varphi) - 100\cos(4\varphi), \quad (5.3)$$

$$V = 103,2 + 50\cos(2\varphi) + 100\cos(2\varphi). \quad (5.4)$$

Они отличающиеся кратностью барьеров, количеством и расположением локальных минимумов. Для них нами определено $m_{\max}$ при заданном M с учетом ε_0 из (4). Соответствующие зависимости приведены на рис. 1 б – 4 б. Видно, что точки хорошо аппроксимируется прямыми линиями.

Рис. 3. Модельный потенциал (5.3). Зависимость индекса $m_{\max}$ наибольшего уровня, достигшего вариационного предела, от размера базиса M при $\varepsilon = 0,1 \text{ см}^{-1}$ и $k = 5$ для (5.3). Результат аппроксимации линейной функцией $m_{\max} = 1,031M - 18,63$ (б).

Рис. 4. Модельный потенциал (5.4). Зависимость индекса $m_{\max}$ наибольшего уровня, достигшего вариационного предела, от размера базиса M при $\varepsilon = 0,1 \text{ см}^{-1}$ и $k = 5$ для (5.4). Результат аппроксимации линейной функцией $1,022M - 13,728$ (б).

В следующих двух примерах рассматриваются случаи несимметричного внутреннего вращения с потенциалами из [6]

$$V = 150 + 100\cos(3\varphi) + 50\sin(\varphi), \quad (6.1)$$

$$V = 150.7 - 50\cos(\varphi) - 100\cos(2\varphi) - 25\sin(\varphi). \quad (6.2)$$

Для потенциалов (6.1-6.2) также были найдены аналогичные зависимости, представленные на рис. 5 и рис. 6.

Рис. 5. Модельный потенциал (6.1). Зависимость индекса $m_{\max}$ наибольшего уровня, достигшего вариационного предела, от размера базиса M при $\varepsilon = 0,1 \text{ см}^{-1}$ и $k = 5$ для (6.1). Результат аппроксимации линейной функцией $m_{\max} = 1,022M - 25,22$ (б).

Рис. 6. Модельный потенциал (6.2). Зависимость индекса $m_{\max}$ наибольшего уровня, достигшего вариационного предела, от размера базиса M при $\varepsilon = 0,1 \text{ см}^{-1}$ и $k = 5$ для (6.2). Результат аппроксимации линейной функцией $m_{\max} = 1,027M - 15,05$ (б).

Как и в случаях симметричных потенциалов, исследуемые зависимости близки к линейным. Угловой коэффициент α в полученных аппроксимациях меняется очень слабо – от 1,015 до 1,034. С учетом

вычислительных погрешностей, можно сказать, что α постоянен и не зависит от вида потенциала, а определяется лишь выбором базиса (2.1). Таким образом угловой коэффициент является мерой эффективности базиса – чем выше α , тем меньше может быть размер базиса для нахождения энергии заданного уровня, а значит меньше и требуемый размер матрицы гамильтониана.

3. Вариационный предел в малых базисах

Определенный интерес, прежде всего для прикладных расчетов, представляет зависимость энергий уровней и энергий переходов в небольших базисах от числа базисных функций, так как для многомерных задач матрицы H_{mn} могут быть просто огромны. Рассмотрим численные примеры достижения вариационного предела для нижних уровней, а также для переходов между ними и прежде всего – для основного перехода.

Рис.7. Зависимость значений E_0 и E_3 и энергии перехода между ними от количества базисных функций для потенциала (5.1) (а). Зависимость значений E_{20} и E_{21} и перехода между ними от количества базисных функций для потенциала (5.1) (б).

Достижение вариационного предела для нижних уровней модельного потенциала (5.1) показано на рис. 7 а. Наибольший интерес представляют нижние уровни и переходы между ними, вычисление которых позволяет производить калибровку модели. Вычисленные значения уровней 0, 1 и 2 численно совпали, что легко объяснимо симметрией потенциала (5.1). В качестве примера высоких уровней, представляющих интерес для термодинамических задач, рассмотрены E_{20} , E_{21} и переход между ними. Вариационные пределы нулевого и третьего уровней достигаются при 19 и 23 базисных функциях соответственно. Из рисунка заметен небольшой горизонтальный участок, в отличие от данных для начальных уровней

молекулы HCN из [13]. Для вариационного предела уровней 20 и 21, показанном на рис. 7 б, также характерен подобный горизонтальный участок. Стоит отметить нетипичное поведение вариационного предела для перехода $21 \rightarrow 20$, также представленное на рис. 7 б. Видно, что приведенная зависимость носит немонотонный характер.

4. Заключение

Полученные результаты позволяют сделать ряд важных выводов. Численное исследование вариационного предела для модельных потенциалов показано, что зависимость индекса $m_{\max}$ наибольшего достоверно вычисленного уровня E_m носит линейный характер. Выяснено, что угловой коэффициент наклона данной зависимости меняется весьма слабо при изменении модельных функций $V(\varphi)$ и для случая (5) при использовании базиса плоских волн принимает значение $\approx 2,07$. Это дает возможность использования величины $m_{\max}$ в качестве численной характеристики (меры) понятия эффективности базиса. Значительный коэффициент углового наклона описанной зависимости свидетельствует об эффективности базиса в прикладных квантовомеханических расчетах. Достижение вариационного предела отдельных уровней и переходов имеет весьма сложную картину и зависит от вида потенциала. В целом, проведенные исследования для широкого класса модельных функций, подтверждают полученные ранее результаты для реальных молекул.

Библиографический список:

1. Внутреннее вращение молекул / под ред. В.Дж. Орвилл-Томаса; пер. с англ. Ю.А. Пентина. – М.: Мир, 1977. – 510 с.
2. **Strekalov, M.L.** Energy levels and partition functions of internal rotation: Analytical approximations / M.L. Strekalov // Chemical Physics. – 2009. – V. 362. – I. 1-2. – P. 75-81. DOI: 0.1016/j.chemphys.2009.06.011.
3. **Harris, D.O.** Calculation of matrix elements for one dimensional quantum mechanical problems and the application to anharmonic oscillators / D.O. Harris, G.G. Engerholm, W.D. Gwinn // The Journal of Chemical Physics. – 1965. – V. 43. – I. 5. – P. 1515-1517. DOI: 10.1063/1.1696963.
4. **Turovtsev, V.V.** Potential and matrix elements of the hamiltonian of internal rotation in molecules in the basis set of Mathieu functions / V.V. Turovtsev, Yu.D. Orlov, A.N. Tsirulev // Optics and Spectroscopy. 2015. – V. 119. – I. 2. – P. 191-194. DOI: 10.1134/S0030400X1508024X.
5. **Павлючко А.И.** Численное исследование вариационного решения ангармонической колебательной задачи в смешанном Морзевском-гармоническом базисе / Павлючко А.И. // Журнал прикладной спектроскопии. – 1992. – Т. 56. – Вып. №3. – С. 474-481
6. **Carrington, T.** Perspective: Computing (ro-)vibrational spectra of molecules with more than four atoms / T. Carrington // The Journal of Chemical Physics. – 2017. – V. 146. – I. 12.

– P. 120902-1-120902-10. DOI: 10.1063/1.4979117.

7. **Lewis, J.D.** Periodic potential functions for pseudorotation and internal rotation / J.D. Lewis, T.B. Malloy, T.H. Chao, J. Laane // *Journal of Molecular Structure*. – 1972. – V. 12. – I. 3. – P. 427-449. DOI: 10.1016/0022-2860(72)87050-9.

8. **Lewis, J.D.** Periodic potential energy functions with sine and cosine terms / J.D. Lewis, J. Laane // *Journal of Molecular Spectroscopy*. – 1977. – V. 65. – I. 1. – P. 147-154. DOI: 10.1016/0022-2852(77)90367-8.

9. **Грибов, Л.А.** Вариационные методы решения ангармонических задач в теории колебательных спектров молекул / Л.А. Грибов А.И. Павлючко. – М.: Наука, 1998. – 334 с.

10. **Эпштейн, С.** Вариационный метод в квантовой химии / С. Эпштейн. – М.: Мир. 1977. – 364 с.

11. **Зенкевич, О.** Конечные элементы и аппроксимация / О. Зенкевич, К. Морган. – М.: Мир, 1986. – 320 с.

12. **Gribov, L.A.** Variational solution of an anharmonic problem for the CO_2 and HCN molecules / L.A. Gribov, A.I. Pavlyuchko, G.F. Lozenko // *Journal of Applied Spectroscopy*. – 1982. – V. 36. – I. 1. – P. 75-80. DOI: 10.1007/BF00618426.

13. **Павлючко, А.И.** О возможности применения вариационного метода для расчета широковозбужденных колебательных уровней энергии многоатомных молекул и оценки барьеров диссоциации вдоль концевых связей / А.И. Павлючко, Г.Ф. Лозенко, Л.А. Грибов // *Оптика и спектроскопия*. – 1985. – Т. 58. – № 5. – С. 1175-1178.

References:

1. Internal rotation in molecules / ed. by W.Y. Orville-Thomas. – London-New York-Sydney-Toronto: John Wiley & Sons, 1974. – XVII, 606 p.

2. **Strekalov, M.L.** Energy levels and partition functions of internal rotation: Analytical approximations / M.L. Strekalov // *Chemical Physics*. – 2009. – V. 362. – I. 1-2. – P. 75-81. DOI: 0.1016/j.chemphys.2009.06.011.

3. **Harris, D.O.** Calculation of matrix elements for one dimensional quantum mechanical problems and the application to anharmonic oscillators / D.O. Harris, G.G. Engerholm, W.D. Gwinn // *The Journal of Chemical Physics*. – 1965. – V. 43. – I. 5. – P. 1515-1517. DOI: 10.1063/1.1696963.

4. **Turovtsev, V.V.** Potential and matrix elements of the hamiltonian of internal rotation in molecules in the basis set of Mathieu functions / V.V. Turovtsev, Yu.D. Orlov, A.N. Tsirulev // *Optics and Spectroscopy*. 2015. – V. 119. – I. 2. – P. 191-194. DOI: 10.1134/S0030400X1508024X.

5. **Pavlyuchko, A.I.** Numerical investigation of variation solution of the anharmonic vibrational problem in the mixed morse-harmonic basis. / A.I. Pavlyuchko // *Journal of Applied Spectroscopy*. – 1992. – V. 56. – I. 3. – P. 302-308. DOI: 10.1007/BF00659116.

6. **Carrington, T.** Perspective: Computing (ro-)vibrational spectra of molecules with more than four atoms / T. Carrington // *The Journal of Chemical Physics*. – 2017. – V. 146. – I. 12. – P. 120902-1-120902-10. DOI: 10.1063/1.4979117.

7. **Lewis, J.D.** Periodic potential functions for pseudorotation and internal rotation / J.D. Lewis, T.B. Malloy, T.H. Chao, J. Laane // *Journal of Molecular Structure*. – 1972. – V. 12. – I. 3. – P. 427-449. DOI: 10.1016/0022-2860(72)87050-9.

8. **Lewis, J.D.** Periodic potential energy functions with sine and cosine terms / J.D. Lewis, J. Laane // *Journal of Molecular Spectroscopy*. – 1977. – V. 65. – I. 1. – P. 147-154. DOI:

10.1016/0022-2852(77)90367-8.

9. **Gribov, L.A.** Variatsionnye metody resheniya angarmonicheskikh zadach v teorii kolebatel'nykh spektrov molekul [Variational methods for solving anharmonic problems in the theory of vibrational spectra of molecules] / L.A. Gribov A.I. Pavlyuchko. – M.: Nauka, 1998. – 334 p. (In Russian).

10. **Epstein, S.T.** The variation method in quantum chemistry. – London: Academic Press, 1974. – 288 p.

11. **Zienkiewicz, O.** Finite elements and approximation / O.C. Zienkiewicz, K. Morgan. – New York: John Wiley & Sons, 1983. – 350 p.

12. **Gribov, L.A.** Variational solution of an anharmonic problem for the CO_2 and HCN molecules / L.A. Gribov, A.I. Pavlyuchko, G.F. Lozenko // Journal of Applied Spectroscopy. – 1982. – V. 36. – I. 1. – P. 75-80. DOI: 10.1007/BF00618426.

13. **Pavlyuchko, A.I.** Possibility of application of the variation method to calculation of highly excited vibrational energy levels of polyatomic molecules and to estimation of dissociation barriers along terminal bonds / A.I. Pavlyuchko, G.F. Lozenko, L.A. Gribov // Optics and Spectroscopy. – 1985. – V. 58. – I. 5. – P. 720-722.

Original paper

MEASURES OF THE BASIS EFFICIENCY IN THE INTERNAL ROTATION PROBLEM

A.N. Belov¹, V.V. Turovtsev², Yu.D. Orlov¹

¹*Tver State University, Tver, Russia*

²*Tver State Medical University, Tver, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.338

Abstract: Definition of the variational limit for the Schrodinger torsion equation solution was considered. Energies of levels and transitions at the variational limits were calculated for different basis sets. With many modeling potentials it was shown that the quantity of reliable calculated levels linearly depends on the number of the basis functions. This number (the number of the maximum reliable state) was recommended as a measure of the basis efficiency. The slope of the straight line for the planar wave basis dependence is approximately equal to 1,03.

Keywords: *internal rotation, Schrodinger torsion equation, basis function, basis efficiency, planar waves.*

Белов Александр Николаевич – старший преподаватель кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Туровцев Владимир Владимирович – д.ф.-м.н., доцент кафедры физики, математики и медицинской информатики ФГБОУ ВО «Тверской государственный медицинский университет»

Орлов Юрий Димитриевич – д.х.н., профессор, заведующий кафедрой общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Alexander N. Belov – instructor of the General Physics Department, Tver State University

Vladimir V. Turovtsev – Dr. Sc., Docent of the Physics, Mathematics and Medical Informatics Department, Tver State Medical University

Yurij D. Orlov – Dr. Sc., Full Professor, Head of the General Physics Department, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 5.09.2020; после рецензирования/revised: 5.10.2020; принята/accepted 10.10.2020.