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 13

ТВЕРЬ 2021

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: Издательство Тверского государственного университета, 2021. – Вып. 13. – 956 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, 2021

© Тверской государственной
университет, 2021

УДК 544.77 : 539.18

Оригинальная статья

ПРЕДСКАЗАНИЕ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ ПО СТРУКТУРНЫМ ДЕСКРИПТОРАМ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСПЛАВОВ

В.С. Мясниченко¹, П.В. Матренин², Н.Ю. Сдобняков¹

¹ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

²ФГБОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет»

630073, Россия, Новосибирск, пр-т К. Маркса, 20

virtson@gmail.com

DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.495

Аннотация: Обсуждается проблема предсказания энергии связи для тернарных металлических наночастиц и построение моделей обучения на базе структурных дескрипторов. Были построены регрессионные зависимости удельной межатомной энергии связи для тернарной наносистемы $Au - Ag - Cu$. Использовался ряд из пяти радиальных признаков, зависящих от попарного межатомного расстояния дескрипторов структуры наночастицы. Для более корректной оценки точности была применена кросс-валидация, далее полученные на валидационных частях выборки результаты усреднялись. Полученная модель ограниченно предсказывает значение удельной межатомной энергии связи внутри группы данных для наночастиц одного состава, а для всей выборки средняя по модулю ошибка составляет 14%. При этом модель практически безошибочно определяет состав наночастицы из нескольких вариантов. Наибольшее значение коэффициента детерминации на всей выборке получено с помощью ансамблевого алгоритма случайный лес. Обнаружена отрицательная корреляция между энергией связи наносплава и положением первого пика радиальной функции распределения для атомов меди.

Ключевые слова: машинное обучение, функция радиального распределения, структурный дескриптор, энергия связи, тернарный наносплав.

1. Введение

Очевидно, что механизмы структурообразования даже в бинарных наночастицах изучены гораздо меньше, чем структурные превращения в однокомпонентных наночастицах [1-3]. Еще в меньшей степени изучены структурные превращения в тернарных наносплавах [4]. Вместе с тем, экспериментальные результаты, связанные со структурой и свойствами тернарных нанокластеров, опережают их теоретическую интерпретацию и развитие компьютерного эксперимента в этой области исследований. Соответственно, остается ряд открытых вопросов, а полученные экспериментальные результаты должным образом не осмыслены и не систематизированы. В частности, это относится к закономерностям образования и стабильности тернарных наноструктур типа ядро-оболочка или Янус-структур, которые также можно рассматривать как изомерные модификации наносплавов данного состава. В этой связи актуальной задачей представляется развитие численных подходов к прогнозированию физико-химических характеристик для моно- и многокомпонентных наночастиц.

В новом десятилетии методы машинного обучения (machine learning – ML) активно применяются в физике и химии для предиктивной обработки большого массива данных о свойствах материалов. Анализируются данные, полученные в рамках компьютерных экспериментов с участием изолированных наночастиц и наносплавов [5]. В частности, анализу подвергаются модели взаимодействия в наночастицах [6], расчета энергии когезии наночастиц [7] или их поверхностной энергии [8, 9].

Сегодня ML модели широко используются для ускоренного построения поверхностей потенциальной энергии [10, 11], классификации, предсказания и генерации атомных структур. Находят применение различные типы структурных дескрипторов и функций [12], в том числе многочастичные дескрипторы (many-body descriptors) [13]. Для биметаллических наночастиц $AgCu$ в работе [14] с использованием методов машинного обучения предпринята попытка предсказания энергии перемешивания (mixing energy) и изучения разнообразия структурных мотивов. Целью данной работы является предсказание энергии связи для тернарных металлических наночастиц на основе структурных дескрипторов.

2. Методика моделирования

Разработка регрессионной ML модели, направленной на предсказание взаимосвязи между структурой вещества в атомном масштабе и его энергетическими характеристиками, включает преобразование декартовых координат атомов в подходящее представление. Структурные дескрипторы, формирующие такое представление, должны быть инвариантны к повороту и переносу наночастицы. При этом они не должны требовать периодичности и симметричности атомной структуры, т.к. наночастица в общем случае не является кристаллом. Этим критериям удовлетворяют, например, производные величины от радиальной функции распределения (radial distribution function – RDF). Заметим, что RDF может быть найдена не только с помощью численных расчетов, но и определена из экспериментальных данных по рассеянию нейтронов и/или рентгеновских лучей.

Нами была построена регрессионная модель удельной межатомной энергии связи (EnergyBinding) для тройной наносистемы $Au-Ag-Cu$. Использовался ряд из пяти признаков (здесь и далее A – обозначение для меди, B – для золота, C – для серебра) которые являются радиальными, зависящими от попарного межатомного расстояния, дескрипторами структуры наночастицы. Все декартовы расстояния измерялись в ангстремах: RdfMassCenter – общий центр масс под первым пиком RDF;

CenterRdfA, CenterRdfB и CenterRdfC – положение первого пика RDF для атомов каждого сорта по отдельности; AvgDistance – среднее по всем атомам расстояние до ближайшего к центру координат атома.

Выборка содержала 9964 элементов. Элементы представляли собой пространственные конфигурации (изомеры) наночастицы $Cu_xAu_yAg_{100-x-y}$ единой нуклеарности 100. Коллекция изомеров получена в молекулярно-динамических экспериментах по охлаждению наночастиц, а также синтетическим путём, т.е. изменением состава имеющихся изомеров наночастиц. Наночастицы имели не менее 20% и не более 40% атомов каждого сорта. Пример атомного строения наночастицы показан на рис. 1.

Рис. 1. Одна из возможных структур наносплава в системе $Au-Ag-Cu$. Показаны формирующие первый пик RDF связи между атомами, являющимися ближайшими соседями (цветовые обозначения: синие линии – между атомами Cu , коричневые – между атомами Au , серые – между атомами Ag и зелёные – смешанные связи).

Для более корректной оценки точности была применена кросс-валидация, пятью разными способами, когда каждый раз 80% направлялось на обучение, а 20% на валидацию предсказания. Полученные на валидационных частях выборки результаты усреднялись.

3. Анализ полученных результатов

В Таблице 1 приведены результаты пяти моделей и их основные гипер-параметры. Реализации алгоритмов взяты из открытой библиотеки [15]. Анализ результатов показал, что все модели, кроме линейной и полиномиальной регрессии безошибочно определяют состав изомера. Однако если рассматривать каждый состав по отдельности, то коэффициент детерминации снижается до 0,38–0,48 в зависимости от состава. Это означает, что точно определять значение EnergyBinding внутри кластера получается с точностью не намного выше, чем дало бы

использование среднего значения кластера.

На рис. 2 показано распределение наночастиц (и EnergyBinding) из всей выборки по координатам CenterRdfA, CenterRdfB, CenterRdfC. Дополнительно нами изучалось распределение по тем же RDF координатам внутри групп фиксированного состава. На рис. 3, рис. 4 показаны результаты для двух таких групп, соответствующих $Cu_{40}Au_{20}Ag_{40}$ и $Cu_{20}Au_{40}Ag_{40}$ составам. Средневзвешенная координата вычислялась с учётом значения EnergyBinding для каждой точки. Далее строился вектор между средней координатой и средневзвешенной координатой.

Рис. 2. Энергия наносплава $Cu_xAu_yAg_{100-x-y}$ в зависимости от трёх RDF дескрипторов.

Таблица 1. Сравнение результатов моделирования.

Модель	Основные гипер-параметры	Коэффициент детерминации R^2	Средняя по модулю ошибка, %	Средне-квадратическая ошибка
Линейная регрессия	—	0,699	52,4	0,0279
Полиномиальная регрессия	второй порядок	0,736	55,6	0,0261
k -ближайших соседей	$k = 9$, евклидово расстояние	0,976	14,9	0,0078
Адаптивный бустинг деревьев решений	Число деревьев 100, максимальная глубина дерева 5	0,985	14,7	0,0063
Случайный лес	Число деревьев 30, максимальная глубина дерева 10	0,991	13,9	0,0067

В обеих группах (составах) обнаружена некоторая отрицательная корреляция энергии связи EnergyBinding с параметром CenterRdfA: средневзвешенная координата смещается на величину порядка $1,0e^{-05}$. С физической точки зрения это означает преимущество у более компактного ядра меди, с меньшей длиной монометаллических $Cu-Cu$ и смешанных $Cu-M$ «связей». Медь имеет наименьший из трёх металлов параметр ГЦК решётки, и вследствие поверхностной сегрегации располагается преимущественно внутри рассматриваемых наночастиц (см. рис. 1).

Рис. 3. Энергия наносплава $Cu_{40}Au_{20}Ag_{40}$ от RDF дескрипторов. Средневзвешенная координата: (2,618, 2,690, 2,807), вектор смещения: $(-8,517 \cdot 10^{-6}, 1,169 \cdot 10^{-6}, -1,075 \cdot 10^{-6})$.

Рис. 4. Энергия наносплава $Cu_{20}Au_{40}Ag_{40}$ от RDF дескрипторов. Средневзвешенная координата: (2,656, 2,750, 2,852), вектор смещения: $(-1,033 \cdot 10^{-5}, -4,271 \cdot 10^{-6}, 6,023 \cdot 10^{-8})$.

4. Заключение

Полученная модель на основе малого набора радиальных дескрипторов ограниченно предсказывает значение EnergyBinding внутри

группы наночастиц одного состава. Имеем точность ненамного выше, чем дало бы использование среднего значения по группе с известным составом наносплава. Возможно, что следует учитывать положение и относительную высоту второго, третьего и последующих пиков RDF.

Модель практически безошибочно определяет состав наночастицы из четырёх вариантов. Также была обнаружена слабая отрицательная корреляция между положением первого пика RDF для атомов *Cu* и энергией связи наносплава независимо от его состава.

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2020-0007). Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-37-70007.

Библиографический список:

1. **Колосов, А.Ю.** О закономерностях формирования моно- и биметаллических наночастиц в процессе коалесценции / А.Ю. Колосов, В.С. Мясниченко, С.С. Богданов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2018. – Вып. 10. – С. 359-367. DOI: 10.26456/pcasenn/2018.10.359.
2. **Мясниченко, В.С.** Размерные зависимости коэффициента линейного расширения и модуля упругости моно- и биметаллических наночастиц / В.С. Мясниченко, Н.Ю. Сдобняков, А.Н. Базулев, П.М. Ершов, Е.М. Давыденкова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. – Вып. 12. – С. 260-273. DOI: 10.26456/pcasenn/2020.12.260.
3. **Myasnichenko, V.** Structural instability of gold and bimetallic nanowires using Monte Carlo simulation / V. Myasnichenko, N. Sdobnyakov, L. Kirilov, R. Mikhov, S. Fidanova // In: Recent Advances in Computational Optimization. Studies in Computational Intelligence; ed. by S. Fidanova. – Cham: Springer, 2020. – V. 838. – P. 133-145. DOI: 10.1007/978-3-030-22723-4_9.
4. **Sdobnyakov, N.Yu.** Simulation of phase transformations in titanium nanoalloy at different cooling rates / N.Yu. Sdobnyakov, V.S. Myasnichenko, C.-H. San et al. // Materials Chemistry and Physics. – 2019. – V. 238. – Art. № 121895. – 9 p. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2019.121895.
5. **Hart, G.L.W.** Machine learning for alloys / G.L.W. Hart, T. Mueller, C. Toher, S. Curtarolo // Nature Reviews Materials. – 2021. – V. 6. – P. 730-755. DOI: 10.1038/s41578-021-00340-w.
6. **Deringer, V.L.** A general-purpose machine-learning force field for bulk and nanostructured phosphorus / V.L. Deringer, M.A. Caro, G. Csányi // Nature Communications. – 2020. – V. 11. – Art. № 5461. – 11 p. DOI: 10.1038/s41467-020-19168-z.
7. **Kart, H.H.** Physical properties of *Cu* nanoparticles: A molecular dynamics study / H.H. Kart, H. Yildirim, S.O. Kart, T. Çağın // Materials Chemistry and Physics. – 2014. – V. 147. – I. 1-2. – P. 204-212. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2014.04.030.
8. **Qi, W.H.** The particle size dependence of cohesive energy of metallic nanoparticles / W.H. Qi, M.P. Wang, G.Y. Xu // Chemical Physics Letters. – 2003. – V. 372. – I. 5-6. – P. 632-634. DOI: 10.1016/S0009-2614(03)00470-6.
9. **Myasnichenko, V.S.** Molecular dynamic investigation of size-dependent surface energy of icosahedral copper nanoparticles at different temperature / V.S. Myasnichenko, M. Razavi, M. Outokesh, N.Yu. Sdobnyakov, M.D. Starostenkov // Letters on materials. – 2016. – V. 6. – I. 4. – P. 266-270. DOI: 10.22226/2410-3535-2016-4-266-270.
10. **Самсонов, В.М.** О размерной зависимости поверхностной энергии и поверхностного натяжения металлических наночастиц / В.М. Самсонов, А.А. Чернышова, Н.Ю. Сдобняков // Известия РАН. Серия Физическая. – 2016. – Т. 80. – № 6. – С. 768-771. DOI: 10.7868/S0367676516060296.
11. **Chiavazzo, E.** Intrinsic map dynamics exploration for uncharted effective free-energy landscapes / E. Chiavazzo, R. Covino, R.R. Coifman et al. // PNAS. – 2017. – V. 114. – I. 28. – P. E5494-E5503. DOI: 10.1073/pnas.1621481114.
12. **Musil, F.** Machine learning for the structure-energy-property landscapes of molecular crystals / F. Musil,

- S. De, J. Yang et al. // *Chemical Science*. – 2018. – V. 9. – I. 5. – P. 1289-1300. DOI: 10.1039/C7SC04665K.
13. **Keith, J.A.** Combining machine learning and computational chemistry for predictive insights into chemical systems / J.A. Keith, V. Vassilev-Galindo, B. Cheng et al. // *Chemical Reviews*. – 2021. – V. 121. – I. 16. – P. 9816-9872. DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00107.
14. **Pozdnyakov, S.N.** Incompleteness of atomic structure representations / S.N. Pozdnyakov, M.J. Willatt, A.P. Bartók et al. // *Physical Review Letters*. – 2020. – V. 125. – I. 16. – P. 166001-1-166001-6. DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.166001.
15. **Roncaglia, C.** Regression and clustering algorithms for AgCu nanoalloys: from mixing energy predictions to structure recognition / C. Roncaglia, D. Rapettia, R. Ferrando // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2021. – V. 23. – I. 40. – P. 23325-23335. DOI: 10.1039/D1CP02143E.
16. Scikit-Learn. Machine learning in Python. – Режим доступа: [www.url: https://scikit-learn.org/stable/](https://scikit-learn.org/stable/). – 15.09.2021.

References:

1. Kolosov A.Yu., Myasnichenko V.S., Bogdanov S.S. et al. On the regularities of formation of mono- and bimetallic nanoparticles in the coalescence process, *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2018, issue 10, pp. 359-367. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.359. (In Russian).
2. Myasnichenko V.S., Sdobnyakov N.Yu., Bazulev A.N., Ershov P.M., Davydenkova E.M. Size dependences of linear expansion and volume elasticity of mono- and bimetallic nanoclusters, *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2020, issue 12, pp. 260-273. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.260. (In Russian).
3. Myasnichenko V., Sdobnyakov N., Kirilov L., Mikhov R., Fidanova S. Structural instability of gold and bimetallic nanowires using Monte Carlo simulation, *Recent Advances in Computational Optimization. Studies in Computational Intelligence*, ed. by S. Fidanova. Cham, Springer, 2020, vol. 838, pp. 133-145. DOI: 10.1007/978-3-030-22723-4_9.
4. Sdobnyakov N.Yu., Myasnichenko V.S., San C.-H. et al. Simulation of phase transformations in titanium nanoalloy at different cooling rates, *Materials Chemistry and Physics*, 2019, vol. 238, art. no. 121895, 9 p. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2019.121895.
5. Hart G.L.W., Mueller T., Toher C., Curtarolo S. Machine learning for alloys, *Nature Reviews Materials*, 2021, vol. 6, pp. 730-755. DOI: 10.1038/s41578-021-00340-w.
6. Deringer V.L., Caro M.A., Csányi G. A general-purpose machine-learning force field for bulk and nanostructured phosphorus, *Nature Communications*, 2020, vol. 11, art. no. 5461, 11 p. DOI: 10.1038/s41467-020-19168-z.
7. Kart H.H., Yildirim H., Kart S.O., Çağın T. Physical properties of Cu nanoparticles: A molecular dynamics study, *Materials Chemistry and Physics*, 2014, vol. 147, issue 1-2, pp. 204-212. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2014.04.030.
8. Qi W.H., Wang M.P., Xu G.Y. The particle size dependence of cohesive energy of metallic nanoparticles, *Chemical Physics Letters*, 2003, vol. 372, issue 5-6, pp. 632-634. DOI: 10.1016/S0009-2614(03)00470-6.
9. Myasnichenko V.S., Razavi M., Outokesh M., Sdobnyakov N.Yu., Starostenkov M.D. Molecular dynamic investigation of size-dependent surface energy of icosahedral copper nanoparticles at different temperature, *Letters on materials*, 2016, vol. 6, issue 4, pp. 266-270. DOI: 10.22226/2410-3535-2016-4-266-270.
10. Samsonov V.M., Chernyshova A.A., Sdobnyakov N.Yu. Size dependence of the surface energy and surface tension of metal nanoparticles, *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics*, 2016, vol. 80, issue 6, pp. 698-701. DOI: 10.3103/S1062873816060290.
11. Chiavazzo E., Covino R., Coifman R.R. et al. Intrinsic map dynamics exploration for uncharted effective free-energy landscapes, *PNAS*, 2017, vol. 114, issue 28, pp. E5494-E5503. DOI: 10.1073/pnas.1621481114.
12. Musil F., De S., Yang J. et al. Machine learning for the structure-energy-property landscapes of molecular crystals, *Chemical Science*, 2018, vol. 9, issue 5, pp. 1289-1300. DOI: 10.1039/C7SC04665K.
13. Keith J.A., Vassilev-Galindo V., Cheng B. et al. Combining machine learning and computational chemistry for predictive insights into chemical systems, *Chemical Reviews*, 2021, vol. 121, issue 16, pp. 9816-9872. DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00107.
14. Pozdnyakov S.N., Willatt M.J., Bartók A.P. et al. Incompleteness of atomic structure representations / // *Physical Review Letters*, 2020, vol. 125, issue 16, pp. 166001-1-166001-6. DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.166001.
15. Roncaglia C., Rapettia D., Ferrando R. Regression and clustering algorithms for AgCu nanoalloys: from

mixing energy predictions to structure recognition, Physical Chemistry Chemical Physics, 2021, vol. 23, issue 40, pp. 23325-23335. DOI: 10.1039/D1CP02143E.

16. Scikit-Learn. Machine learning in Python. Available at: [www.url: https://scikit-learn.org/stable/](https://scikit-learn.org/stable/) (accessed 15.09.2021).

Original paper

PREDICTION OF BONDING ENERGY BY STRUCTURAL DESCRIPTORS OF METAL NANOALLOYS

V.S. Myasnichenko¹, P.V. Matrenin², N.Yu. Sdobnyakov¹

¹*Tver State University, Tver, Russia*

²*Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.495

Abstract: The problem of predicting the binding energy for ternary metal nanoparticles and the construction of learning models based on structural descriptors are discussed. Regression dependences of the specific interatomic bond energy were constructed for the ternary *Au – Ag – Cu* nanosystem. A number of five radial features were used, depending on the pairwise interatomic distance of the nanoparticle structure descriptors. For a more correct assessment of the accuracy, cross-validation was applied, then the results obtained on the validation parts of the sample were averaged. The resulting model limitedly predicts the value of the specific interatomic binding energy within a group of data for nanoparticles of the same composition. For the entire sample the average error in modulus is 14 %. In this case, the model almost accurately determines the composition of a nanoparticle of several variants. The largest value of the coefficient of determination in the entire sample was obtained using an ensemble random forest algorithm. A negative correlation was found between the binding energy of the nanoalloy and the position of the first peak of the radial distribution function for copper atoms.

Keywords: *machine learning, radial distribution function, structural descriptor, bond energy, ternary alloy.*

Мясниченко Владимир Сергеевич – научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Павел Викторович Матренин – к.т.н., старший преподаватель кафедры «Системы электроснабжения предприятий» ФГБОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет»

Сдобняков Николай Юрьевич – к.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Vladimir S. Myasnichenko – Researcher, General Physics Department, Tver State University

Pavel V. Matrenin – Ph. D., Senior Lecturer, «Power Supply Systems of Enterprises» Department, Novosibirsk State Technical University

Nickolay Yu. Sdobnyakov – Ph. D., Docent, General Physics Department, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 04.09.2021; после рецензирования/revised: 05.10.2021; принята/accepted 12.10.2021.