

ПРОГРАММНАЯ ОБОЛОЧКА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ  
МАССОПЕРЕНОСА В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

С. А. Запрягаев, С. И. Грищенко, Е. В. Бутырская

*Воронежский государственный университет*

Поступила в редакцию 12.02.2016 г.

**Аннотация.** Представлена программная оболочка для проведения модельных исследований по массопереносу в углеродных нанотрубках. Моделирование основано на использовании принципов молекулярной динамики. Приведены результаты экспериментов по переносу атомов He в углеродных нанотрубках различных хиральностей.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, углеродные нанотрубки.

**Annotation.** The program shell is presented for the model studies of mass transport in the carbon nanotubes. The simulation is based on the molecular dynamics principles. The results of some experiments are presented on the transfer of He atoms in carbon nanotubes of different chirality.

**Keywords:** molecular dynamics, carbon nanotubes.

**ВВЕДЕНИЕ**

Молекулярная динамика является одним из вычислительных методов, используемых для компьютерного моделирования процессов, происходящих в сложных молекулярных структурах. Молекулярно динамическое моделирование основывается на использовании феноменологических потенциалов, описывающих различные типы взаимодействий в таких структурах [1]. В классической модели динамики молекулярной структуры исследуются классические уравнения движения молекулы под действием сил. В настоящей работе представлена программная оболочка для моделирования массопереноса атомов (молекул) в углеродных нанотрубках (УНТ) на основе метода молекулярной динамики. Структура углеродной нанотрубки определяется координатами составляющих ее атомов углерода, являющихся неподвижными центрами в процессе движения частиц внутри

УНТ. Движение частицы внутри УНТ описывается законами Ньютона

$$m\vec{a} = \vec{F},$$

где  $m$  – масса частицы,  $\vec{F}$  – сила взаимодействия частицы с атомами С, образующими УНТ.

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ**

Математическая модель основана на использовании классических уравнений движения с учетом сил взаимодействия между частицами и начальных условий их движения. Чтобы найти траектории движения частиц, соответствующие заданным начальным условиям, требуется решить систему дифференциальных уравнений второго порядка:

$$\ddot{\vec{r}} = \vec{F}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, t); \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (1)$$

где  $n$  – число частиц в рассматриваемой системе,  $\vec{r}$  – радиус-вектор « $i$ »-ой частицы, а  $\vec{F}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, t)$  – функция, связанная с взаимодействием « $i$ »-ой частицы с остальными частицами системы. Для большого числа частиц в системе и сложных молекулярных взаимо-

© Запрягаев С. А., Грищенко С. И., Бутырская Е. В., 2016

действий прямое численное решение системы (1) затруднено. Для упрощения задачи нахождения траектории движения частиц в молекулярной динамике популярным методом является метод, предложенный Верле [2]. Идея метода основана на разложении проекции вектора траектории движения частицы в ряд Тейлора в моменты времени  $(t + \Delta t)$  и  $(t - \Delta t)$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \dot{x}(t)\Delta t + \frac{\ddot{x}(t)\Delta t^2}{2} + \frac{\dddot{x}(t)\Delta t^3}{6} + o(\Delta t^4), \quad (2)$$

$$x(t - \Delta t) = x(t) - \dot{x}(t)\Delta t + \frac{\ddot{x}(t)\Delta t^2}{2} - \frac{\dddot{x}(t)\Delta t^3}{6} + o(\Delta t^4). \quad (3)$$

Складывая соотношения (2) и (3), получаем рекуррентное соотношение следующего вида:

$$x(t + \Delta t) = 2x(t) - x(t - \Delta t) + \ddot{x}(t)\Delta t^2 + o(\Delta t^4). \quad (4)$$

Равенство (4) показывает, что, зная положение точки в моменты времени  $t$  и  $t - \Delta t$ , а также ускорение (силу) в момент времени  $t$ , можно рассчитать положение точки в следующий момент времени  $t + \Delta t$  с ошибкой  $o(\Delta t^4)$ . Следовательно, данный метод довольно точно описывает движение частиц и удобен при классическом описании движения молекул под действием заданных сил. При использовании метода Верле необходимо расширить начальные условия заданием координат частиц в двух предыдущих точках.

## ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Для примера в настоящей работе рассматриваются молекулы движущейся в нанотрубке заданной структуры. В первом приближении атомы С, из которых состоит нанотрубка, жестко зафиксированы в пространстве. Компьютерная модель предполагает, что нанотрубка неподвижна, и жесткая фиксация молекул трубки означает отсутствие сил, которые действуют на атомы С нанотрубки со стороны атомов самой трубки. Таким образом, для всех атомов трубки пра-

вая часть соответствующего уравнения в системе (1) равна нулю. Начальный вектор скорости атомов трубки тоже нулевой, и заданы только координаты атомов С.

Уравнение движения молекулы  $m_A$  с учетом взаимодействия с  $N$  атомами стенок нанотрубки можно описать с помощью потенциала Леннарда-Джонса [1]. Уравнение движения для такой молекулы имеет вид:

$$m_A \frac{d^2 \vec{r}_A}{dt^2} = \sum_{i=1}^N \frac{48\varepsilon}{\sigma^2} \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{Ai}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left( \frac{\sigma}{r_{Ai}} \right)^8 \right] \vec{r}_{Ai}. \quad (5)$$

Здесь  $\vec{r}_A$  – радиус-вектор положения молекулы  $m_A$  в пространстве,  $\varepsilon$  и  $\sigma$  – параметры потенциала взаимодействия  $m_A$  с атомом углерода С,  $N$  – число атомов С в углеродной нанотрубке,  $\vec{r}_{Ai} = \vec{r}_i - \vec{r}_A$  – расстояние от молекулы  $m_A$  до « $i$ »-го атома С на «поверхности» трубки,  $r_{Ai} = |\vec{r}_i - \vec{r}_A|$ .

Известно, что радиус нанотрубки  $R$  с заданными параметрами хиральности  $(n, m)$  определяется выражением

$$R = 1.42 \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + n \cdot m} \text{ \AA}. \quad (6)$$

Для перехода к безразмерному уравнению (5) введем единицу измерения времени  $\tau_0$  по определению:  $t = \tau_0 \tau$ , где  $\tau$  – безразмерное время. В этом случае  $\tau_0 = \sqrt{\frac{m_A \sigma^2}{\varepsilon}}$ . В результате безразмерное уравнение (5) будет иметь вид

$$\frac{d^2 \vec{r}_A}{dt^2} = 48 \sum_{i=1}^N \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{Ai}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left( \frac{\sigma}{r_{Ai}} \right)^8 \right] \vec{r}_{Ai}. \quad (7)$$

Параметры потенциала Леннарда-Джонса определяются при взаимодействии одинаковых атомов. В настоящей работе выполнены расчеты движения атома **He** внутри углеродной нанотрубки. Для такого комбинированного взаимодействия He-C параметр  $\sigma$  выбирается как среднее значение параметров взаимодействия одинаковых атомов  $\sigma_{C-He} = (\sigma_{C-C} + \sigma_{He-He}) / 2$ . В настоящей работе параметры  $\sigma_{C-C}$  и  $\sigma_{He-He}$  определены следующими значениями:  $\sigma_{C-C} = 3.03 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_{He-He} = 2.63 \text{ \AA}$ . В результате  $\sigma_{C-He} = 2.83 \text{ \AA}$ .

Аналогично параметр  $\varepsilon$  в комбинированном взаимодействии неодинаковых атомов определяется как

$$\begin{aligned} \varepsilon_{C-He} &= \sqrt{\varepsilon_C \cdot \varepsilon_{He}} = \\ &= \sqrt{51.2 \cdot 6.03} [\text{K}^\circ] \cong 17.96 [\text{K}]. \end{aligned} \quad (8)$$

При выбранных параметрах

$$\tau_0 = \sqrt{\frac{m_A \sigma^2}{\varepsilon}} \cong 5.52 \cdot 10^{-12} \text{ с.}$$

Численное значение начальной скорости молекулы  $m_A$  может быть выражено через температуру  $T$  и, например, для атома He при  $T = 293\text{K}$  равна

$$v_0 = \sqrt{\frac{3kT}{m_A}} \cong 1.35 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1} \cong 75 \text{ \AA} \cdot \tau_0^{-1}. \quad (9)$$

Уравнение (7) с введенными параметрами (8), (9) определяет физическую модель движения атома He в УНТ.

## ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Для реализации алгоритма вычисления координаты частицы по методу Верле был использован объектно-ориентированный язык программирования Java как эффективный высокоуровневый язык, использующийся при

математическом моделировании и позволяющий обеспечить удобный интерфейс.

Интерфейс программной оболочки разработан на основе технологии Java FX 2.0 и включает выполнение следующих операций:

- описание сил, действующих на частицы, аналитическими функциями;
- задание начального положения и скорости для частиц системы;
- сохранение и загрузка файлов с описаниями систем уравнений, созданных в данной программной оболочке;
- визуализация движения частиц в трехмерном пространстве;
- запуск группы заданий, в рамках которых меняются начальные условия движения в заданных интервалах. После выполнения заданий, результаты сохраняются в текстовом файле.

Для удобства расширения функциональных возможностей программы в качестве архитектуры графического интерфейса выбран распространенный подход MVC («Модель-Представление-Контроллер»). MVC – это схема использования нескольких шаблонов проектирования, с помощью которых модель

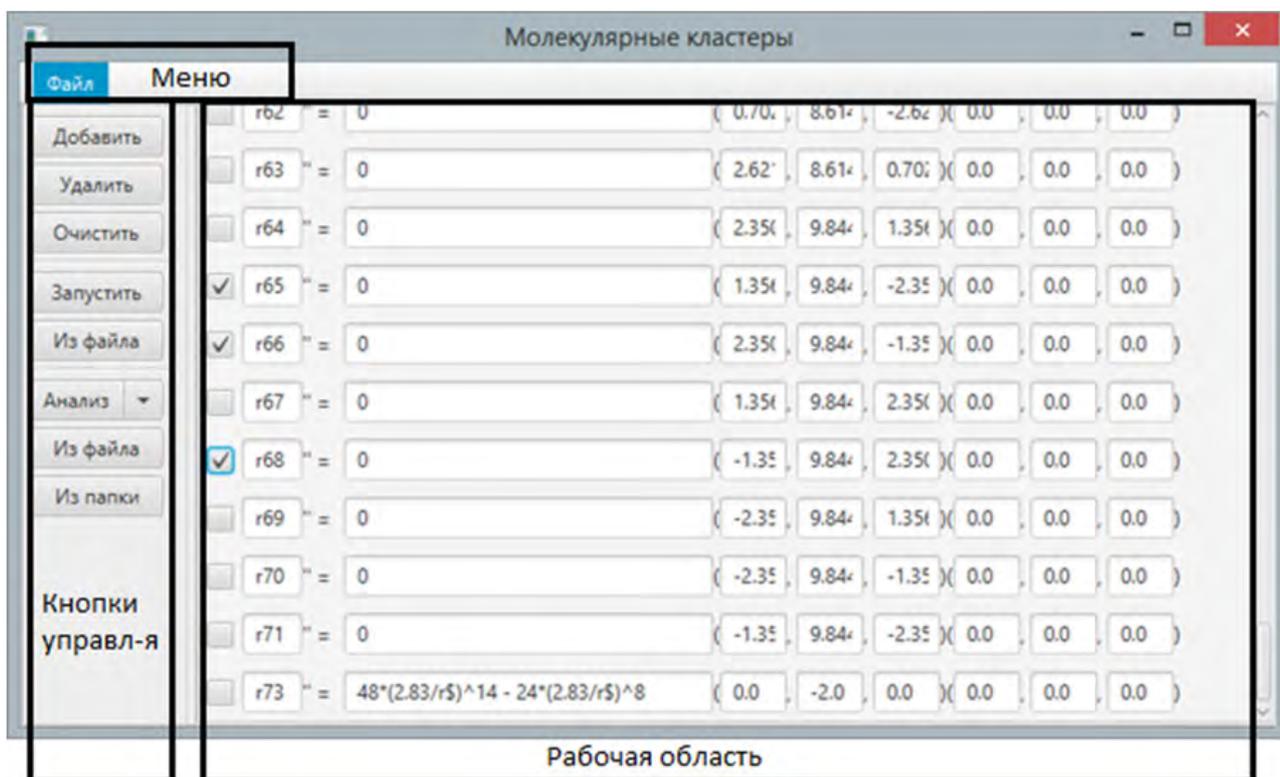


Рис. 1. Скриншот графического интерфейса программы

приложения, пользовательский интерфейс и взаимодействие с пользователем разделены на три отдельных компонента таким образом, чтобы модификация одного из компонентов оказывала минимальное воздействие на остальные.

На рис. 1 представлен скриншот, иллюстрирующий основной интерфейс программной оболочки.

Интерфейс оболочки разделен на две части: рабочая область и кнопки управления. Для работы с файлами используется меню в верхней части рабочего окна. Данное меню содержит три пункта:

- «Открыть» – запускает диалоговое окно для выбора и открытия файла, в котором содержится сохраненное описание системы уравнений;
- «Сохранить» – запускает диалоговое окно для выбора каталога в файловой системе, в котором будет сохранен файл, содержащий текущее состояние описания системы уравнений;
- «Настройки...» – запускает диалоговое с настройками программы.

Рабочая область состоит из последовательности строк, каждая из которых описывает одно векторное дифференциальное уравнение движения частицы из моделируемой системы. Строка в рабочей области имеет следующий набор элементов:

- чекбокс, используемый для маркировки строки;
- поле ввода текстовой метки для частицы (метка может использоваться при описании силы, действующей на частицу);
- поле ввода аналитического выражения, описывающего модуль силы, действующей на частицу;
- три поля ввода для задания декартовых проекций координаты начального положения частицы и три поля для ввода декартовых проекций вектора скорости частицы в начальный момент времени.

Кнопки управления объединяются в группы и выполняют следующие функции:

- *Группа кнопок для редактирования системы дифференциальных уравнений в рабочей области:*

- о кнопка «Добавить» – добавление новой строки в рабочей области;

- о кнопка «Удалить» – удаление из рабочей области строк, отмеченных с помощью чекбокса;

- о кнопка «Очистить» – удаление всех строк в рабочей области и добавление одной незаполненной строки.

- *Группа кнопок для запуска динамической трехмерной модели движения частицы:*

- о кнопка «Запустить» – запуск динамической трехмерной модели движения частиц на основании заданной в рабочей области системы уравнений. Визуализация движения частиц осуществляется в отдельном окне (см. рис. 2);

- о кнопка «Из файла» – запуск динамической трехмерной модели движения частиц из загрузочного файла описания системы уравнений и начальных условий задачи, сохраненной в файле после проведения предварительных экспериментов или этапа ввода данных. После нажатия кнопки открывается диалоговое окно для выбора файла.

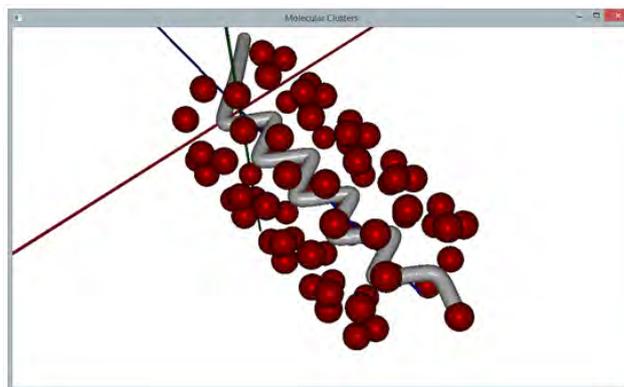


Рис. 2. Скриншот трехмерной модели движения системы частиц

- *Группа кнопок для запуска серии экспериментов:*

- о кнопка «Анализ» – запуск задания на расчет траекторий движения частицы в углеродной нанотрубке. После проведения каждого эксперимента сохраняется файл с его результатами. После проведения всех расчетов формируются текстовые файлы «AvgFreePath.txt» (средняя длина свободного пробега), «AvgSpeed.txt» (средняя скорость), «PathLength.txt» (длина пройденного пути), «PathLengthToTubeLength.txt» (длина прой

денного пути, отнесенная к длине углеродной нанотрубки), «DiffusionCoeff.txt» (коэффициент диффузии) со сводными результатами экспериментов. При нажатии указателя выбора на кнопке «Анализ» предлагается выбрать один из двух типов задания (рис. 3);

о кнопка «Из файла» обеспечивает вывод результатов расчета в отдельное информационное окно для задания, выбранного в диалоговом окне и содержащего результаты этого расчета (рис. 4). Данный файл должен быть сохранен после выполнения запущенного задания;

о кнопка «Из папки» обеспечивает пересчет сводных результатов экспериментов после выбора в диалоговом окне папки с сохраненными результатами экспериментов.

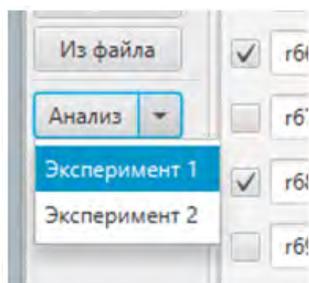


Рис. 3 Вид интерфейса после выбора кнопки «Анализ»

Первый тип задания (пункт «Эксперимент 1» на рис. 3): из системы уравнений выбирается одна частица (выбор производится с помощью значения, указанного в поле для текстовой метки в настройках приложения на вкладке «Анализ»). По умолчанию выбирается последняя частица в списке на рабочей области. В соответствии с заданными настройками для выбранной частицы последовательно изменяется начальное положение. При этом координата  $X$  начального положения частицы изменяется от 0 до  $R$  с шагом  $R/10$ , где  $R$  радиус трубки.  $R$  вычисляется на основе заданных параметров хиральности трубки, указанных в настройках. Вектор начальной скорости выбирается таким образом, чтобы между вектором скорости и осью трубки были образованы углы от  $0^\circ$  до  $81^\circ$  с шагом  $9^\circ$  для каждого значения начального положения частицы. В результате запуска задания первого типа будут получены результаты расчетов траекторий движения частиц.

Для второго типа задания (пункт «Эксперимент 2» на рис. 3) в интерфейсе открывается диалоговое окно для выбора файла с данными о траектории движения частиц, сохраненного после выполнения первого задания. На основе данных из выбранного файла, определяется угол между вектором скорости и осью трубки в начальный момент движения указанной в окне настроек частицы. С выбранным значением угла с шагом  $9^\circ$  в интервале от  $90^\circ$  до  $90^\circ$  изменяется угол между проекцией начального вектора скорости на ось  $OX$  и осью  $OY$  (начальный вектор скорости «скользит» по поверхности конуса выбранного угла). При этом вычисляются все вышеперечисленные характеристики и дополнительно определяется угол вылета атома из нанотрубки.

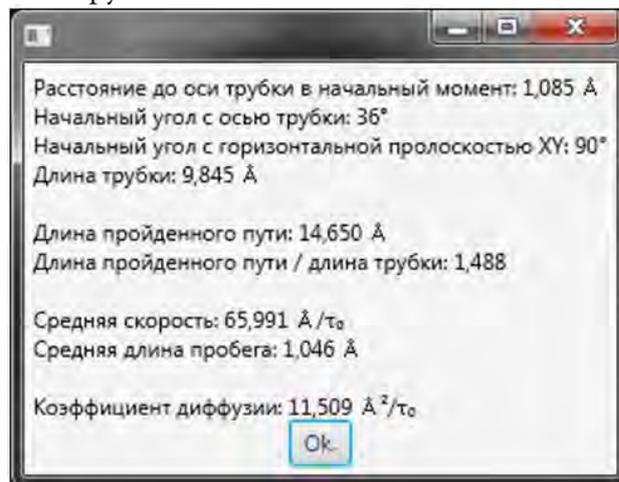


Рис. 4 Скриншот информационного окна с результатами эксперимента

После ввода выбранных параметров модели и нажатия на кнопку запуска из графического интерфейса считываются введенные данные, на их основе генерируется набор объектов Java, ассоциированных с уравнениями системы дифференциальных уравнений, и запускается алгоритм расчета траекторий частиц на основе метода Верле. После завершения расчета в новом окне открывается и запускается трехмерная динамическая модель молекулярного кластера, описанного пользователем в интерфейсе, и шлейф траектории движения атома. Для примера на рис. 2 красные шары – атомы  $C$  нанотрубки в текущий момент времени, а мелкие серые точки

определяют траекторию движения частицы внутри кластера (благодаря малому шагу по времени  $t$  они выглядят как сплошной шлейф).

Расчет траекторий движения и запуск заданий можно настраивать в меню в верхней части рабочего окна, выбрав пункт «Настройки» (см. рис. 5). В диалоговом окне, изображенном на рис. 5, во вкладке «Основное» производится настройка параметров расчета траекторий движения частиц, а во вкладке «Анализ» – настройка параметров, используемых для инициализации модели при запуске заданий на выполнение расчетов.

Для работы с аналитическими формулами, описывающими силы, действующие на частицы, использована сторонняя библиотека *exp4j*, что позволяет редактировать файлы, хранящие данные о молекулярных системах, в любом текстовом редакторе. Для сохранения этих данных используется механизм преобразования объектов Java в формат JSON. Обеспечение этого механизма и обратного механизма десериализации обеспечивается сторонней библиотекой *Gson*.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Расчеты движения атома гелия внутри углеродной нанотрубки были проведены при следующих условиях:

1. Два типа трубок с хиральностями – (4,4) и (7,7).
2. Длина трубок (в обоих случаях)  $\approx 9.8$  ангстрем.
3. Ось трубки совпадает с осью OY системы координат
4. Начальное положение атома гелия в декартовых координатах  $(x_0, y, z) = (-iR, -3, 0)$ , где  $R$  – радиус трубки (в Å, а  $i$  изменяется от 0 до 0,9 с шагом в 0,1. Таким образом задано изменение начального положения атома гелия перед его движением в сторону «цилиндра» трубки. Значение  $y = 0$  соответствует нижнему основанию «цилиндра» трубки. Другими словами, в начальном положении атом гелия смещен по оси трубки во внешней области трубки от нижнего основания на 3 Å.
5. Начальная скорость движения атома гелия выбрана  $\approx 1,35 \cdot 10^{13}$  ангстрем в секунду, что соответствует температуре 293°K.
6. Вектор начальной скорости атома образует с осями координат следующие углы: с осью OZ –  $0^\circ$ , с осью OY –  $j \cdot 90^\circ$ , где  $j$  изме-

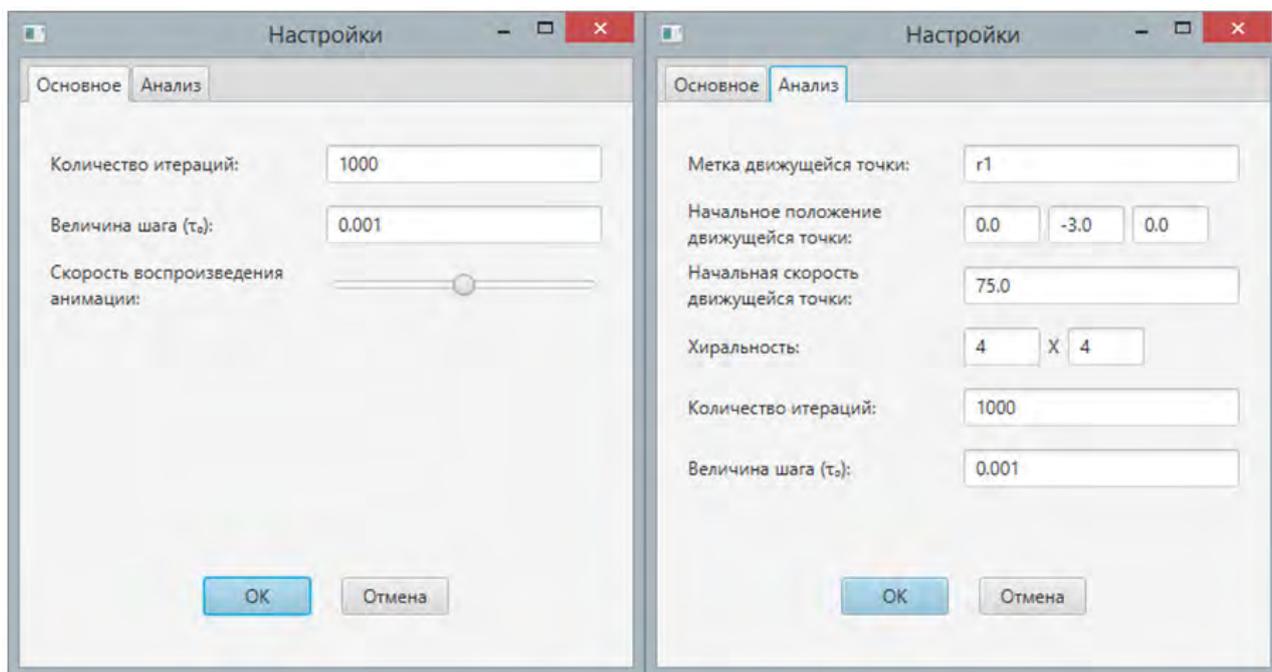


Рис. 5 Скриншоты окон настроек

няется от 0 до 0,9 с шагом 0,1 (угол с осью ОХ из этих условий определяется однозначно).

В итоге выполнены расчеты в 200-х экспериментах. При этом вычислялись следующие параметры:

1) длина пройденного пути частицы в трубке;

2) отношение длины пройденного пути к длине трубки;

3) средняя скорость движения атома в трубке ( $v$ );

4) среднее значение длины свободного пробега ( $l$ );

5) коэффициент диффузии ( $D = v \cdot l / 6$ ).

Результаты выполненных экспериментов показали, что для углеродной нанотрубки с хиральностью (4,4) значения длины пройденного пути частицы в ангстремах лежит в диапазоне от 9.98 Å (начальная точка движения на оси трубки, начальная скорость расположена по оси трубки) до 27.94 Å (начальная точка движения смещена от оси трубки к плоскости стенки трубки на величину  $0.9R$ , угол наклона вектора начальной скорости составляет  $36^\circ$ ). Трехкратное увеличение пройденного пути связано с периодическим отскоком частицы от стенок трубки при ее продольном перемещении по трубке. Средняя скорость движения атома, необходимая для определения коэффициента диффузии, вычислялась как отношение длины трубки ко

времени нахождения частицы в трубке. Среднее значение длины свободного пробега вычислялось как математическое среднее длин отрезков траектории движения частицы внутри трубки, на которых производные параметров траектории движения частицы как функций от времени не меняли знака (ни одна из функций  $x(t)$ ,  $y(t)$  и  $z(t)$ ). Коэффициенты диффузии для трубки с хиральностью (4,4) представлены в табл. 1.

Нулевые значения коэффициента диффузии в табл. 1 указывают на значения начальных параметров, при которых атом He не проникает в углеродную нанотрубку и отталкивается от нее.

Аналогичные расчеты для трубки с хиральностью (7,7) длины свободного пробега и коэффициенты диффузии представлены в табл. 2 и табл. 3 соответственно.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленная программная оболочка является удобным инструментом исследования явлений массопереноса в углеродных нанотрубках, позволяющим реализовать визуальное наблюдение траекторий движения и вычисление значимых характеристик явлений массопереноса.

Таблица 1  
Коэффициент диффузии ( $D = v \cdot l / 6$ ) в нанотрубке хиральности (4,4)  $\text{Å}^2 \cdot \tau_0^{-1}$

$i \backslash j$	$0^\circ$	$9^\circ$	$18^\circ$	$27^\circ$	$36^\circ$	$45^\circ$	$54^\circ$
0	24.7	20.56	16.74	0	0	0	0
$R \cdot 0,1$	24.45	24.54	16.63	11.41	0	0	0
$R \cdot 0,2$	25.02	24.66	20.68	16.72	0	0	0
$R \cdot 0,3$	18.75	25.05	20.58	13.34	0	0	0
$R \cdot 0,4$	13.73	18.46	24.82	12.2	11.51	0	0
$R \cdot 0,5$	0	14.95	21.41	18.27	13.39	0	0
$R \cdot 0,6$	0	0	16.96	15.23	14.97	0	0
$R \cdot 0,7$	0	0	0	17.12	17.47	12.1	0
$R \cdot 0,8$	0	0	0	0	14	12.94	0
$R \cdot 0,9$	0	0	0	0	11.29	12.6	0

Таблица 2

Длина пройденного пути частицы в нанотрубке хиральности (7,7) Å

$i \backslash j$	0°	9°	18°	27°	36°	45°	54°	63°	72°
0	9.9	9.98	10.24	10.99	11.98	13.5	17.55	0	0
R·0,1	9.91	9.98	10.36	10.99	12.06	13.88	15.45	0	0
R·0,2	9.91	9.98	10.37	10.98	11.98	14.04	16.8	0	0
R·0,3	9.91	9.98	10.29	10.98	12.06	13.52	17.49	0	0
R·0,4	9.91	9.98	10.28	10.98	12.06	14.11	15.69	30.94	0
R·0,5	9.85	9.98	10.28	11.06	11.99	13.74	38.4	0	0
R·0,6	9.86	9.98	10.28	11.04	12.05	13.73	16.14	35.38	0
R·0,7	9.86	9.91	10.28	11.03	11.98	13.96	17.03	21.23	0
R·0,8	9.99	10	10.36	11.03	11.97	13.59	16.03	26.81	0
R·0,9	12.52	10.36	10.36	11.03	11.9	13.87	17	18.03	0

Таблица 3

Коэффициент диффузии ( $D = v \cdot l / 6$ ) в нанотрубке хиральности (7,7) Å<sup>2</sup>·τ<sub>0</sub><sup>-1</sup>

$i \backslash j$	0°	9°	18°	27°	36°	45°	54°	63°	72°	81°
0	123.87	41.63	18.21	27.2	49.26	55.36	53.23	0	0	0
R·0,1	123.88	124.84	21.62	22.66	37.19	34.17	62.28	0	0	0
R·0,2	123.9	124.81	32.44	33.96	36.94	57.6	40.71	0	0	0
R·0,3	123.96	124.8	128.69	22.62	29.75	55.46	42.33	0	0	0
R·0,4	124.06	124.81	128.61	22.64	24.78	57.89	31.66	53.14	0	0
R·0,5	123.32	124.84	128.56	34.41	36.95	42.3	77.12	0	0	0
R·0,6	15.45	124.91	128.54	69.04	29.71	42.24	39.09	70.83	0	0
R·0,7	123.72	124.1	128.54	69.01	49.22	57.25	41.16	51.25	0	0
R·0,8	124.97	125.2	129.52	137.92	49.14	55.73	48.68	64.75	0	0
R·0,9	51.5	129.6	129.58	137.87	48.85	56.87	34.33	54.6	0	0

Работа поддержана ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014–2020 годы», соглашение № 14.574.21.0112 от 21.10.2014, уникальный идентификатор проекта RFMEFI57414X0112.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. The Art of Molecular Dynamics Simulation // D.C. Rapoport / Cambridge University Press. Second Edition. – 2004.
2. Verle L. Computer experiments on classical fluids. Thermodynamic properties of Lenard-Jones molecules// Phys. Rev. – 1967. – V. 159. – P. 98–103.
3. JavaFX 2.0 – <http://docs.oracle.com/javase/8/javase-clienttechnologies.htm>
4. exp4j – <http://www.objecthunter.net/exp4j/>
5. GSON – <https://code.google.com/p/google-gson/>

**Запрягаев С. А.** – д. физ.-мат. наук, профессор, кафедра цифровых технологий, Воронежский государственный университет.  
E-mail: zsa@cs.vsu.ru

**Zapryagaev S. A.** – Dr. phys.- math. sciences, professor, Department of digital technology, Voronezh State University.  
E-mail: zsa@cs.vsu.ru

**Грищенко С. И.** – магистрант кафедры цифровых технологий, Воронежский государственный университет.  
E-mail: grishhenko\_s\_i@sc.vsu.ru

**Grishchenko S. I.** – Graduate student of the Department of digital technology, Voronezh State University.  
E-mail: grishhenko\_s\_i@sc.vsu.ru

**Бутырская Е. В.** – д. хим. наук, профессор, кафедра аналитической химии, Воронежский государственный университет.  
E-mail: bev5105@yandex.ru

**Butyrskaya E. V.** – Dr. chem. sciences, Professor, Department of Analytical Chemistry, Voronezh State University.  
E-mail: bev5105@yandex.ru