

Металлургия и материаловедение Metallurgy and Materials

Научная статья

УДК 51-74

DOI: <https://doi.org/10.18721/JEST.28202>



Л.Н. Блинов, Н.И. Крылов ✉, *Ю.А. Хватов*

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

✉ nikkrylov49@mail.ru

МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ПОНЯТИЯХ И ЗАКОНАХ ХИМИИ

Аннотация. Представлены результаты обсуждения формализации некоторых понятий и законов химии с помощью математических формул. При формализации химической теории были использованы различные математические подходы и инструменты для описания химических процессов. Были определены базовые виды формул, которые должны содержаться в различных физико-химических теориях и показано различие между химической и математической аксиоматикой. Показано, что любую химическую систему элементов можно представить в виде системы уравнений, выражающих состояние системы с некоторыми ограничениями. Как правило, состояние и воздействие на систему выражаются обычно в виде дифференциальных уравнений. Приведены примеры расчета областей стеклообразования сложных стеклообразующих систем с помощью математического моделирования, проведено сравнение с экспериментом и установлена хорошая сходимость рассчитанных и экспериментальных областей стеклообразования.

Ключевые слова: теория, гипотеза, законы, определения, химические процессы, математические формулы.

Для цитирования:

Блинов Л.Н., Крылов Н.И., Хватов Ю.А. Методы математических вычислений в понятиях и законах химии // *Материаловедение. Энергетика.* 2022. Т. 28, № 2. С. 18–28. DOI: <https://doi.org/10.18721/JEST.28202>

Research article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JEST.28202>*L.N. Blinov, N.I. Krylov* ✉, *Yu.A. Khvatov*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russia✉ nikkrylov49@mail.ru

METHODS OF MATHEMATICAL CALCULATIONS IN CONCEPT AND PRINCIPLES OF CHEMISTRY

Abstract. In this work some attempts were made to formalize concepts and principles with the help of mathematic formulas. Due to the formalization of chemical theory, various mathematical tools have been used to describe chemical processes. The basic types of formulas that should be contained in any physical and chemical theory were determined and the difference between chemical and mathematical axiomatics was shown. It is shown that any chemical system of elements can be represented as a system of equations expressing the state of the system + imposed restriction. As a rule, the state and impact on the system are expressed in the form of differential equations. It has been established that many mathematical equations do not always realistically describe chemical systems, in particular closed systems. Examples of calculation of glass formation area of complex glass-forming systems are given, with the help of mathematical modeling a comparison with experiment is made, and good convergence of the calculated and experimental glass formation regions is established.

Keywords: theory, hypothesis, principle, definitions, chemical processes, mathematic formula.

Citation:

L.N. Blinov, N.I. Krylov, Yu.A. Khvatov, Methods of mathematical calculations in concept and principles of chemistry, Materials Science. Power Engineering, 28 (02) (2022) 18–28, DOI: <https://doi.org/10.18721/JEST.28202>

Введение. Во все времена в теории физики, химии, естествознания исследователи стремились трактовать законы, предположения путём полной формализации понятий, вводя математические пространства с соответствующими свойствами и рассматривая исследуемые объекты с точки зрения математических объектов, подверженных воздействиям операторов, которые в свою очередь обладают своими исключительными характеристиками, обусловленными их химическими и физическими свойствами [1–8].

То есть происходит формализация понятий, благодаря чему можно в дальнейшем работать с конкретными объектами, описывая воздействия на них формально с помощью систем уравнений [9, 10].

Целью данной работы является нахождение путей формализации некоторых понятий и законов химии с помощью математических формул.

Методы и материалы

В современных философских, математических и естественнонаучных языках под *теорией* понимается не просто случайное мнение, а гипотетико-дедуктивная система, то есть множество формул, порождаемых с помощью логики и математики группой начальных предположений. В силу общности некоторых из этих начальных предположений, а также возможностей для преобразования, которые предоставляются логикой и математикой, каждая теория представляет собой некоторое бесконечное множество формул. Эта мысль касается всех возможных ситуаций, охватываемых универсальным законом и всех выводов из любой данной функции, встречающейся в

теории. Уже на этом основании, то есть потому, что каждая теория бесконечно богата, не может быть и речи об ее окончательном доказательстве. Поэтому лучшее, что мы можем сделать, так это подтвердить теорию в возможно большем числе случаев или опровергнуть ее в некоторых критических пунктах. Однако от опасности опровержения часто ограждаются не только тем, что отказываются признавать неблагоприятные свидетельства, но и также подгонкой некоторых компонент теории, особенно значений, приписываемых определенным параметрам.

Некоторые из первоначальных предположений физико-химической теории именуется *гипотезами* (в эпистемологическом, а не логическом смысле). Гипотезы, будь то частные или общие, идут дальше простого описания наблюдаемых ситуаций. Они представляют собой предположения о реальной действительности независимо от того, наблюдаемы ли, хотя бы частично, эти ситуации или нет. Так, имеется гипотеза о том, что тела существуют, другая о том, что масса сохраняется. Некоторые из гипотез, входящих явным или неявным образом в физико-химическую теорию, являются чисто математическими по своей природе в том смысле, что они обуславливают математические характеристики рассматриваемых понятий, например понятие симметрии тензора. Другие имеют более или менее непосредственное физико-химическое содержание в том смысле, что касаются свойств реальных систем или систем, о которых предполагают, что они реально существуют.

Результаты обсуждений

Наиболее важными среди физико-химических гипотез любой теории являются, конечно, законы. Утверждение о законе имеет цель сказать что-либо об объективных структурах или моделях существования и изменениях физико-химических систем. Оно не передает информации о частных ситуациях и не говорит нам, как выглядит мир для некоторого наблюдателя. Формулировка закона предполагается универсальной и не зависимой от наблюдателя. Уравнения движения, полевые уравнения, уравнения композиции и уравнения состояний квалифицируются как законы лишь в той степени, в какой они принадлежат к достаточно подтвержденным теориям. Дальнейшие физико-химические гипотезы служат *вспомогательными гипотезами*, такими, как начальные условия, граничные условия и ограничения степеней свободы.

Предполагается, что всякая физико-химическая гипотеза может быть сформулирована математически. Но одна только математическая форма ничего не скажет нам о физическом значении формулы. Так, формула $E_n = -\kappa/n^2$ может что-то обозначать. О формуле, не имеющей фиксированного значения, можно сказать, что она семантически неопределенна, то есть не определена относительно своего значения. Она станет семантически определенной после ее дополнения внешними предположениями (обычно интуитивно подразумеваемыми) относительно некоторых символов, включенных в нее. Так, в нашем начальном примере E_n могло стать значением для энергии водородоподобного атома на n -ном уровне. В ином контексте тот же самый типографский знак «потребовал» бы (то есть ему было бы приписано) другого физико-химического значения. Такие дополнительные предположения, обрисовывающие контуры химического значения символов, могут быть названы *семантическими предположениями*.

Данные, то есть утверждения, полученные с помощью наблюдения или эксперимента, составляют еще один вид начальных предположений. Они начальны в том смысле, что их следует предполагать в порядке, обусловленном некоторыми логическими заключениями или теоремами. Конечно, не предполагается, что данные нужно выдумывать, то есть они не являются априорными. Они не могут быть также получены с помощью одного только эксперимента. Скорее, напротив, данные, которые могут войти в химическую теорию, должны быть выражены в терминах теории и получены с помощью инструментов, сконструированных и рассчитанных с помощью ряда теорий. Одним словом, данные не даются, а находятся, и если они соответствуют химической теории, то они «пропитаны» теорией, а не являются непосредственным выражением вос-

приятый или переживаний наблюдателя. Четвертый вид предпосылок, встречающихся в теории, представляют собой *определения*. Например, скорость протекания реакции:

$$U_{\text{мгн}} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta C}{\Delta t} = \frac{dC}{dt}, \quad \text{где } C = \frac{n}{V}.$$

С формальной точки зрения любое определение – это только лингвистическая конвенция, то есть правило употребления используемых символов; она ничего не говорит нам о природе. Конвенциональная природа дефиниций не делает, однако, их произвольными. Вопрос о том, что может быть определено в теории, а что нет, разрешим только в том случае, когда теория перестроена аксиоматически. И выбор способа определения понятий (неопределяемых, основных, или первичных) должен направляться такими критериями, как его общность и плодотворность.

Отметим различие между определениями и гипотезами, в частности утверждениями о законах. В то время как первые являются понятиями, описывающими отношения внутри теории, последние соотносят утверждения с реальностью. Следовательно, если определения могут быть подвергнуты только концептуальной критике, то утверждения о законах живут в соответствии с принципами экспериментальной проверки. Однако это элементарное различие часто забывается.

Итак, мы имеем следующие виды формул, которые должны содержаться в любой физико-химической теории (рис. 1).

Рассмотрим пример химической аксиоматики. Следует подчеркнуть, что они в одном важном отношении должны отличаться от систем аксиом в чистой математике. В самом деле, в то время как последние *определяют* целые семейства *формальных* объектов или структур, такие, как, например, решетки или топологические пространства, цель наших систем аксиом состоит в *характеристике* (а не определении) *видов* конкретных объектов, а именно физико-химических систем, которые, по предположению, имеют независимое существование. Поэтому, если специалист по математической аксиоматике строит свою сеть аксиом безотносительно к реальному миру, то специалист по физико-химической аксиоматике обязан оставаться в границах земного.

То есть, хотя физико-химические аксиоматики и будут заимствовать все необходимые для них математические идеи, они не могут до конца придерживаться аксиоматического стиля чистой математики, которая сводит аксиоматизацию к определению некоторого сложного предиката, обычно строящегося на множестве теоретических компонент.

Такую аксиоматическую дефиницию можно было бы квалифицировать и как *математическую* теорию, хотя и не очень интересную. Но ее нельзя квалифицировать как *физико-химическую* теорию, потому что ей может удовлетворять любое число объектов, как формальных, так и конкретных. Мы не можем строить физико-химические системы на основе одного лишь воображения, как это делают математики, изобретая те или иные математические пространства. В отличие от гильбертова пространства любая структура строится не из множества теоретических понятий, она не определяется в рамках теории множеств и не конструируется с ее помощью, она строится из атомов, сил взаимодействия и т. д. Самое лучшее, что мы можем сделать, это дать правильное описание некоторой структуры с помощью тщательно разработанных понятий и утверждений. Напротив, целью химической аксиоматики является разъяснение особенностей *химической* теории вообще и главных характеристик частных физических теорий. И для этого она использует формальные инструменты, которые созданы совсем в другом месте – а именно в чистой математике.

Химические процессы превращения веществ отражают качественные и количественные изменения в строении. Они записываются посредством химических формул исходных и полученных веществ и математических знаков (цифр, знака равенства). А составление уравнения химической реакции заключается в нахождении и записи цифровых значений коэффициентов перед форму-

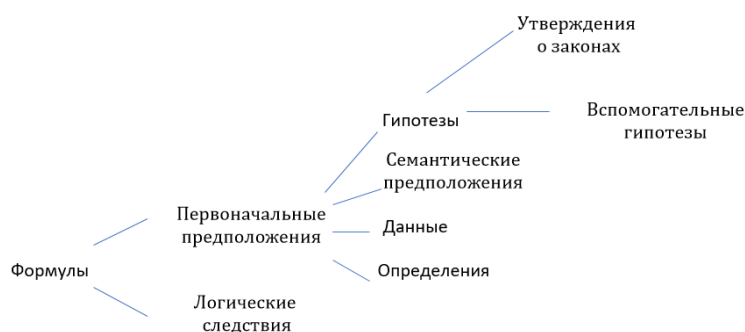
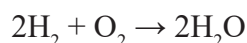


Рис. 1. Виды формул, содержащиеся в любой физико-химической теории
 Fig. 1. Types of formulas contained in any physical-chemical theory

лами веществ, участвующих в реакции с тем, чтобы в соответствии с законом сохранения массы число атомов каждого элемента в левой и правой частях химического уравнения было одинаковым. Например, уравнение химической реакции образования воды имеет вид:



Таким образом, использование в химических реакциях закона сохранения массы взаимно однозначно соответствует решению полиномиального уравнения:

$$a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_n = b_0 x^n + b_1 x^{n-1} + \dots + b_n.$$

Достаточный признак равенства 2-ух полиномов – равенство коэффициентов в левых и правых частях при соответствующих степенях аргумента. Где степень полинома определяется количеством элементов, участвующих в реакции. Каждому конкретному элементу соответствует своя степень, начиная с нулевой.

Рассмотрим химическую систему элементов. По определению химическая система – совокупность химических частиц и веществ, между которыми происходят или могут происходить химические реакции с образованием новых веществ – продуктов реакции.

Каждую механическую, химическую систему можно представить в виде системы уравнений, выражающих состояние системы с некоторыми ограничениями. Как правило, состояние и воздействие на систему выражаются в виде дифференциальных уравнений (диффур), так как производные 0-ых, 1-ых и высших порядков способны характеризовать химический или физический процесс, протекающий в системе, а также результаты процесса.

Большую проблему представляет тот фактор, что математические уравнения взаимно однозначно описывают происходящие процессы, если они полностью описывают состояние системы при любых определенных параметрах. Следовательно, система должна быть изолированной от внешних, не учитываемых факторов.

Реально ли сделать систему замкнутой? Ведь химической системы, не имеющей массо- и теплообмена с окружающей средой не существует. Тогда, как учесть теплопередачу с окружающей средой, потери? Необходимо ввести погрешность измерений, зависящих от соответствующих параметров.

Погрешность подобных вычислений складывается из:

$$R_{\text{полная}} = R_{\text{методическая}} + R_{\text{округления}} + R_{\text{неустраняемая}}.$$

Методическая и будет представлять собой однозначность введения нашей системы.

Простейший же случай формализации системы реакций можно представить в виде линейного дифференциального уравнения 1-го порядка:

$$X' = P(t)X + G(t) \text{ с начальным условием } X(t_0) = X_0.$$

Решение поставленной задачи Коши может быть записано так:

$$X(t) = X_0 + Y(t) \int_{t_0}^t Y^{-1}(\tau) G(\tau) d\tau, \text{ где } Y(t) = e^{\int P(t) dt}.$$

Однако, разумнее, используя теорию управления, ввести функцию $u(t)$ – вектор управления (воздействия):

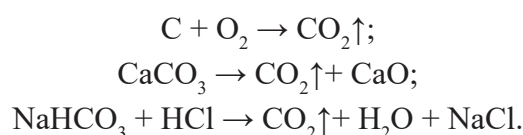
$$\dot{X} = A(t)X + B(t)U + W(t),$$

где $A(t)$ – матрица преобразования (невырожденная); $B(t)$ – матрица параметров управления; $W(t)$ – векторная функция воздействия иных внешних факторов.

Следует отметить, что при рассмотрении этих уравнений необходимо вводить ограничения в соответствии с принципами стехиометрических реакций, то есть вводимые ограничения и будут характеризовать определенные соотношения между количеством вступающих в реакцию исходных веществ и образующихся продуктов.

Рассмотрим закон постоянства состава. Он интересен для нашего рассмотрения, т.к. аналог вычислений, производимых формальным путём, не всегда согласуется с этим законом. Причина – методическая погрешность.

Рассмотрим этот закон подробнее: каждое химически чистое соединение, независимо от условий и способа его получения, имеет постоянный качественный и количественный состав. Согласно закону постоянства состава соотношения между массами атомов элементов, входящих в состав данного соединения, постоянны. Например, диоксид углерода CO_2 состоит из одного атома углерода и двух атомов кислорода независимо от метода получения:



Дело в том, что для определения системы химических реакций мы можем формально ввести какую угодно систему, удовлетворяющую абсолютно всем условиям. Но на практике нам необходимо рассматривать такие системы, которые можно было бы однозначно решить (Михайлов М.Д. Химия: учеб. пособие / М.Д. Михайлов, Н.И. Крылов, И.А. Соколов. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2013. 263 с.)

В «Теории интегрального анализа и методов вычислений» мы вводим интегральную организацию вычислений для машинных кодов.

Для каждой из реакций мы вводим свою замкнутую систему уравнений и получаем на выходе в результате итерации соответствующие решения.

Пусть $f = \text{CO}_2$ в нашем случае в формальном определении решения. Пусть $\sigma_1 = f_1 - f$; $\sigma_2 = f_2 - f$, соответствующие погрешности в результате работы программы. Рассмотрим $(f_1 - f_2) = (f + \sigma_1) - (f + \sigma_2) = \sigma_1 - \sigma_2$.

Как видно, произошло своеобразное «обнажение» погрешностей. В итоге получен отнюдь не нуль. Мы даже не можем отнести абсолютную погрешность результата к точному результату, то

есть к нулю. А теперь представим, что у нас происходит серия наблюдений химических реакций и в результате мы исследуем, какие же получаются на выходе вещества и с какими количественными характеристиками. Где для каждой реакции существует своя погрешность.

Рассмотрим для простоты одну и ту же реакцию, проводимую n раз.

Пусть I_n – количественная мера одного из элементов продуктов реакции, тогда

$$I_n = \frac{1}{e} \int_0^1 x^n e^x dx, \quad n = 0, 1, \dots, \quad \text{где } I_n > 0 \text{ всегда!}$$

$$I_n \geq I_{n+1}, \quad \text{т.е. } I_n \text{ – убывающая функция } n.$$

Известно, что $I_0 = 1 - e^{-1}$. Теперь выразим I_{n-1} : интегрируем по частям.

Можем получить последовательность I_1, I_2, \dots . Уже при n порядка 10-15 появляются неподобные значения I_n , например, отрицательные. Это связано с отрицанием близких величин. Отсюда и формируется большая погрешность.

Итак, при формализации химической теории мы используем различные математические инструменты для описания процессов. Однако математическая формализация, математический анализ служат лишь инструментом, языком описания процессов. В настоящее время химия, физика тесно связаны друг с другом. И обе науки мы рассматриваем как области, в которых эксперименты согласуются с теорией. Теория же целиком и полностью определяется формальными определениями и системами уравнений, характеризующие процессы реакций. Все они выведены в виде математических записей и формулировок.

В простейшем примере мы вводим реагирующие вещества: $a_1, a_2, \dots, a_n, \dots$. Вводим функции взаимодействия. Например, T – вектор температур, P – вектор давлений. В результате действия функций получаем выходящий вектор состояния системы

$$\text{Result} = f(A, T, P, \dots) = MA(T, P, \dots);$$

f может быть и оператором дифференцирования параметров, интегрирования и т.д. Примеры дифференцирования приведены выше.

Особенный интерес представляет уравнение Шредингера, вводимое при изучении строения атома и свойств квантовой энергии. Оно интересно тем, что в одной формуле используются и вероятностные меры, и оператор двойного дифференцирования, и стандартные алгебраические операции. Это уравнение в общем виде выглядит так:

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \hat{H}\Psi,$$

где $\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U(\vec{r}, t)$ – оператор полной энергии частицы (оператор Гамельтона), $\Psi(\vec{r}, t)$ волновая функция, \vec{r} – координаты частицы, i – мнимая единица, m_0 – масса частицы, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h – постоянная Планка, $U(\vec{r}, t)$ – внешняя по отношению к частице потенциальная энергия в точке $M(\vec{r})$ в момент времени t .

Это уравнение позволяет найти волновую функцию $\Psi(\vec{r}, t)$, как функцию координат и времени, определить плотность вероятности нахождения частицы в любой точке пространства в любой момент времени и тем самым полностью описать квантовое состояние частицы, движущейся в силовом поле.

Видно, что можно манипулировать операторами и выбирать подходящие нам. Соответственно будет меняться и погрешность вычисления.

Однако, при использовании математических операторов всегда необходимо помнить, в пространстве с какими свойствами мы работаем. Проблемы могут начаться с первых простейших шагов использования законов коммутативности, дистрибутивности, ассоциативности в алгебраических пространствах (определяя, скажем, закон Генри-Дальтона о сумме парциальных давлений), заканчивая использованием разложений наших функций в бесконечные ряды и выполнением операций над ними.

Первая попытка по математической химии была сделана М.В. Ломоносовым. Его рукопись *Elementa Chimiae Mathematicae* («Элементы математической химии») была найдена после смерти среди его бумаг. Книга была написана в 1741 г. В XIX веке понятие «математическая химия» использовал Э. Дзюбуа-Реймон. В 1984 г. была издана книга, названная «Принципы математической химии». В современной химии термин «математическая химия» был введен в 1970-х годах.

Математическая химия (некоторые ее относят к компьютерной химии) – область исследования, посвященная новым применениям математики к химическим задачам. Основная область интересов-математическое моделирование гипотетически возможных физико-химических и химических явлений и процессов, а также их зависимость от свойств атомов и структуры молекул. Математическая химия допускает построение моделей без привлечения квантовой механики. Критерием истины в математической химии является математическое доказательство, вычислительный эксперимент и сравнение результатов с экспериментальными данными.

Важнейшую роль в математической химии играет математическое моделирование с использованием компьютеров. В связи с этим математическую химию в узком смысле, иногда называют компьютерной химией, которую не следует путать с вычислительной химией (Блинов Л.Н. и др. Химия. Современная классификация. Синописис химии: учеб. пособие. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2016. 326 с.)

В начале 90-х годов XX столетия была предложена количественная взаимосвязь между стеклообразующей способностью термодинамически стабильного расплава и природой химического взаимодействия его компонентов с учетом ковалентного, ионного, донорно-акцепторного взаимодействий, металлизации химической связи и атомных характеристик химических элементов (главное n , орбитальное l , магнитное m_l квантовые числа и зарядовое число моля атомов z , входящих в данное вещество). Показано, что предложенное соотношение позволяет оценить с большой достоверностью стеклообразующую способность вещества любого состава и химической природы. Приведены примеры расчета областей стеклообразования бинарных, тройных и более сложных стеклообразующих систем. Проведено сравнение с экспериментом и установлена хорошая сходимость рассчитанных и экспериментальных областей стеклообразования. В работах [3, 5], было установлено, что исходя из атомно-структурных характеристик компонентов вещества z , n , l , m_l можно рассчитать теоретическую стеклообразующую способность расплава G_T по формуле:

$$G_T = \frac{\bar{n}\bar{k}}{\bar{z}}, \text{ где}$$

\bar{k} -жесткость электронного каркаса химических связей (ЭКХИС) является функцией электронной структуры свободного атома, определяемой квантовыми числами

По степени отклонения полученных значений G от полуэмпирической зависимости

$$G_{п.э.} = \frac{\sqrt{\bar{z}^2 + AB} - \bar{z}}{A}, \text{ где } A \text{ и } B \text{ – постоянные, } A = 30,84 \pm 3,19, B = 9,04 \pm 0,23$$

делалось заключение о возможности получения сплавов в стеклообразном состоянии при самопроизвольном охлаждении расплава. Если отклонение не превышало 10%, то считалось, что данный состав может быть получен в стеклообразном состоянии. В работе [11] приведены результаты расчета и экспериментального определения области стеклообразования в системах Ge–S–Br и Ge–Se–Br, которые хорошо согласуются. В других работах приводятся данные по использованию теоретических расчетов для определения конкретного количества составов стеклообразных и кристаллических неорганических материалов [11–17].

Заключение

- Были определены базовые виды формул, которые должны содержаться в любой физико-химической теории и показано различие между химической и математической аксиоматикой.
- Показано, что любую химическую систему элементов можно представить в виде системы уравнений, выражающих состояние системы с некоторыми ограничениями. Как правило, состояние и воздействие на систему выражаются обычно в виде дифференциальных уравнений.
- Проанализирована количественная взаимосвязь между стеклообразующей способностью термодинамически стабильного расплава и фундаментальными характеристиками атомов элементов: квантовыми числами, зарядами их ядер и приведены конкретные примеры расчета.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- [1] **Блинов Л.Н. и др.** «Основные понятия, термины и законы химии». СПб.: Изд-во СПбГТУ, 1999. 133 с.
- [2] **Байдаков Л.А., Блинов Л.Н.** О корреляции между атомно- структурными характеристиками расплавов и их способностью к стеклообразованию // Физ. и хим. стекла. 1987. Т. 13. № 3. С. 340–345.
- [3] **Гутенев М.С.** Диэлектрические свойства в структуре стекла. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010. 292 с.
- [4] **Соколов И.А.** Стеклообразные твердые электролиты. Структура и природа поверхности. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010. 392 с.
- [5] **Корольков Д.В., Скоробогатов Г.А.** Теоретическая химия. Изд. 2-е, перераб. и доп. СПб.: Изд-во Петербургского ун-та, 2005. 655 с.
- [6] **Харгитгаи И., Харгитгаи М.** Симметрия глазами химика. М.: Мир, 1985. 134 с.
- [7] **Клинков В.А., Семенча А.В., Блинов Л.Н.** Оптические и магнетохимические свойства неклассических стеклообразных материалов. – СПб.: Изд-во ВВМ, 2021. 124 с.
- [8] **Klinkov V.F.** Influence of small additions of germanium on the physical properties of chalcogenide glasses based on composition As_{30,5}S_{44,5}I₂₅ // Journal of Physics: Conference Series. Iop Publishing, 2021. V. 2103, № 1. С 012152.
- [9] **Меньшиков Г.Г.** «Интегральный анализ и методы вычислений», СПб, 1998. 185 с.
- [10] **Еремин В.В.** Математика в химии. М.: МЦНМО, 2011. 64 с.
- [11] **Крылов Н.И.** Получение и свойства стеклообразных полупроводниковых материалов в системах (Ge–S–Br и Ge–Se–Br). Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук. СПб, 2010. 18 с.
- [12] **Shelby J.E.** Introduction to glass science and technology / Royal Society of Chemistry, UK- 2020. ISBN: 978-1-83916-141-4.
- [13] **Klinkov V.A. et al.** Theoretical and experimental behavior of optical properties of Er³⁺ doped fluoroaluminate glasses // Materials Research Bulletin. 2021, V. 141. С. 111352.
- [14] **Blinov L.N., Semench A.V.** Mass Spectrometry of Chalcogenide Glass and Carbon Nitrides // Glass Physics and Chemistry, 2019. V. 45, № 6. Pp. 428–438.

[15] **Блинов Л.Н.** Магнетохимия слабомагнитных стеклообразных и кристаллических материалов (обзор) // Физ. и хим. стекла. 2017. Т. 43, № 1. С. 3–21.

[16] **Иванов В.Г. и др.** Квантово-оптические устройства. Физические основы функционирования и принципы построения приемников излучения. – СПб.: ВКА им. А.Ф. Можайского, 2017. 266 с.

[17] **Филачев А.М., Таубкин И.И., Трищенко М.А.** Фотоприемники в оптико-электронных приборах и системах. – М.: Физматкнига, 2016. 104 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЛИНОВ Лев Николаевич – профессор, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, д-р хим. наук.
E-mail: office@spbstu.ru
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8508-8413>

КРЫЛОВ Николай Иванович – доцент, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, канд. хим. наук.
E-mail: nikkrylov49@mail.ru
ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1256-1131>

ХВАТОВ Юрий Алексеевич – профессор, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, д-р физ.-мат. наук.
E-mail: chvat@mail.ru
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7918-8207>

REFERENCES

- [1] **L.N. Blinov i dr.**, «Osnovnyye ponyatiya, terminy i zakony khimii». SPb.: Izd-vo SPbGTU, 1999. 133s.
- [2] **L.A. Baydakov, L.N. Blinov**, O korrelyatsii mezhdru atomno- strukturnymi kharakteristikami rasplavov i ikh sposobnostyu k stekloobrazovaniyu // Fiz. i khim. stekla. 1987. T. 13. № 3. S. 340–345.
- [3] **M.S. Gutenev**, Dielektricheskiye svoystva v strukture stekla. SPb.: Izd-vo Politekhn. un-ta, 2010.-292s.
- [4] **I.A. Sokolov**, Stekloobraznyye tverdye elektrolity. Struktura i priroda poverkhnosti. SPb.: Izd-vo Politekhn. un-ta, 2010. 392 s.
- [5] **D.V. Korolkov, G.A. Skorobogatov**, Teoreticheskaya khimiya. Izd. 2-ye, pererab. i dop. SPb.: Izd-vo Peterburgskogo un-ta, 2005. 655 s.
- [6] **I. Khargittai, M. Khargittai**, Simmetriya glazami khimika. M.: Mir, 1985. 134 s.
- [7] **V.A. Klinkov, A.V. Semenchа, L.N. Blinov**, Opticheskiye i magnetokhimicheskiye svoystva neklassicheskikh stekloobraznykh materialov. – SPb.: Izd-vo VVM, 2021. 124 s.
- [8] **V.F. Klinkov**, Influence of small additions of germanium on the physical properties of chalcogenide glasses based on composition As_{30,5}S_{44,5}I₂₅ // Journal of Physics: Conference Series. Iop Publishing, 2021. V. 2103, № 1. C 012152.
- [9] **G.G. Menshikov**, «Integralnyy analiz i metody vychisleniy», SPb, 1998. 185 s.
- [10] **V.V. Yeregin**, Matematika v khimii. M.: MTsNMO, 2011. 64 s.
- [11] **N.I. Krylov**, Polucheniye i svoystva stekloobraznykh poluprovodnikovyykh materialov v sistemakh (Ge-S-Br i Ge-Se-Br). Avtoreferat dissertatsii na soiskaniye uchenoy stepeni kandidata khimicheskikh nauk. SPb, 2010. 18 s.
- [12] **J.E. Shelby**, Introduction to glass science and technology /Royal Society of Chemistry, UK- 2020. ISBN: 978-1-83916-141-4.

- [13] **V.A. Klinkov et al.**, Theoretical and experimental behavior of optical properties of Er 3+ doped fluoroaluminate glasses // *Materials Research Belleten*. 2021, V. 141. С. 111352.
- [14] **L.N. Blinov, A.V. Semenchа**, Mass Spectrometry of Chalcogenide Glass and Carbon Nitrides // *Glass Physics and Chemistry*, 2019. V. 45, № 6. Pp. 428–438.
- [15] **L.N. Blinov**, Magnetokhimiya slabomagnitnykh stekloobraznykh i kristallicheskikh materialov (obzor) // *Fiz. i khim. stekla*. 2017. T. 43, № 1. S. 3–21.
- [16] **V.G. Ivanov i dr.**, Kvantovo-opticheskiye ustroystva. Fizicheskiye osnovy funktsionirovaniya i printsipy postroyeniya priyemnikov izlucheniya. – SPb.: VKA im. A. F. Mozhayskogo, 2017. 266 s.
- [17] **A.M. Filachev, I.I. Taubkin, M.A. Trishchenkov**, Fotopriyemniki v optiko-elektronnykh priborakh i sistemakh. – M.: Fizmatkniga, 2016. 104 s.

INFORMATION ABOUT AUTHORS

Lev N. BLINOV – *Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*.

E-mail: office@spbstu.ru

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8508-8413>

Nikolay I. KRYLOV – *Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*.

E-mail: nikkrylov49@mail.ru

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1256-1131>

Yurij A. KHVATOV – *Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*.

E-mail: chvat@mail.ru

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7918-8207>

Поступила: 24.05.2021; Одобрена: 14.06.2022; Принята: 14.06.2022.

Submitted: 24.05.2021; Approved: 14.06.2022; Accepted: 14.06.2022.