

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ САХАРОЗЫ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

© 2022 г. В. И. Дещеня<sup>a,b,\*</sup>, Н. Д. Кондратюк<sup>a,b,c</sup>, А. В. Ланкин<sup>a,b</sup>, Г. Э. Норман<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),  
Московская область, Долгопрудный, Россия

<sup>b</sup> Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

<sup>c</sup> Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, Москва, Россия

\*e-mail: [deshchenia.vi@phystech.edu](mailto:deshchenia.vi@phystech.edu)

Поступила в редакцию 28.08.2021 г.

После доработки 28.08.2021 г.

Принята к публикации 15.09.2021 г.

Для водного раствора сахарозы методом классической молекулярной динамики рассчитаны температурные зависимости плотности, а также коэффициентов вязкости и диффузии в диапазоне температур 273–343 К. Вычислен гидродинамический радиус молекулы сахарозы в водном растворе. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

*Ключевые слова:* сахароза, молекулярная динамика, раствор сахара, диффузия, вязкость

DOI: 10.31857/S0044453722030086

Моно- и полисахариды широко распространены в природе [1, 2]: они важны для функционирования всех живых клеток, входят в состав клеточной стенки растений и выполняют разнообразные биологические функции. Кроме того, материалы на основе полисахаридов, в первую очередь, целлюлоза, находят широкое применение в технике. Мембраны на основе эфиров целлюлозы, чаще всего ацетата целлюлозы, применяются при опреснении морской воды методом обратного осмоса [3], очистке воды от высокомолекулярных примесей и примесей тяжелых металлов [4–7]. Мембраны на основе эфиров целлюлозы могут быть интересны и как разделительные мембраны в электрохимических источниках тока, таких, как Red/Ox-элементы [8]. Все это делает интересным изучение свойств водных растворов моно- и полисахаридов, а также взаимодействия нерастворимых полисахаридов с водой.

Важнейшие параметры, определяющие протекание процессов в водных растворах сахаров, – транспортные коэффициенты, такие как коэффициенты диффузии и вязкости. Информация о них важна для описания как биологических систем, где сахара играют очень важную роль, так и различных технологических процессов в промышленности, в частности связанных с извлечением сахарозы из различных видов сырья. Построение моделей, пригодных для описания транспортных коэффициентов в водных раство-

рах сахаров требует понимания процессов, протекающих на молекулярном уровне.

Методы молекулярной динамики (МД) повсеместно применяются для исследования структуры и свойств жидкостей [9–12]. Примеры расчета динамических свойств водных растворов приведены в работах [11, 13–15]. При этом точность и достоверность молекулярного моделирования определяется тем, насколько качественно классические потенциалы для МД воспроизводят межатомное взаимодействие исследуемых молекул между собой и с молекулами воды. Верификация широкого многообразия межатомных потенциалов на основе актуальных экспериментальных или квантово-химических данных – важная задача современной МД [16–19].

В данной работе исследуется применимость метода молекулярной динамики для корректного описания уравнения состояния и транспортных свойств на примере водного раствора сахарозы. Сахароза – крупнотоннажный промышленный продукт, поэтому экспериментальные данные о её свойствах доступны в литературе [20–25].

### МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

#### *Потенциал межатомного взаимодействия*

Для описания молекулярных связей в молекуле сахарозы использовался потенциал Optimized Potentials for Liquid Simulations All-Atom (OPLS-AA)

[26] с коррекцией парциальных зарядов  $1.14 \cdot \text{CM1A}$  [27, 28] на атомах, включающий ковалентные и невалентные взаимодействия между атомами:

$$E = E_{\text{valent}} + E_{\text{non-valent}}.$$

Ковалентные взаимодействия описываются гармоническими колебаниями ковалентных связей, углов между тремя атомами и торсионными взаимодействиями:

$$E_{\text{valent}} = E_{\text{bond}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{dihedral}}.$$

Данные взаимодействия определяются следующим образом в модели:

$$E_{\text{bond}} = K_b(r - r_0)^2, \quad E_{\text{angle}} = K_a(\Theta - \Theta_0)^2,$$

где  $K_b$  и  $K_a$  — энергетические константы,  $r_0$  и  $\Theta_0$  — равновесные значения длины связи и угла между атомами соответственно. Торсионные взаимодействия для силового поля OPLS-AA описываются следующим соотношением:

$$E_{\text{dihedral}} = \frac{1}{2} K_{d1}(1 + \cos(\phi)) + \frac{1}{2} K_{d2}(1 - \cos(2\phi)) + \frac{1}{2} K_{d3}(1 + \cos(3\phi)) + \frac{1}{2} K_{d4}(1 - \cos(4\phi)),$$

где  $K_{d1}$ ,  $K_{d2}$ ,  $K_{d3}$ ,  $K_{d4}$  — энергетические константы,  $\phi$  — торсионный угол между соответствующими плоскостями, проведенными через тройки атомов.

Невалентные взаимодействия описываются леннард-джонсовским и электростатическим потенциалами:

$$E_{\text{non-valent}} = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + C \frac{q_i q_j}{r},$$

где  $r$  — расстояние между взаимодействующими атомами,  $\epsilon$  и  $\sigma$  — параметры взаимодействия для данной пары атомов,  $q_i$  и  $q_j$  — заряды атомов. Для атомов внутри одной молекулы, разделенных тремя связями, взаимодействие учитывается с весом 0.5.

Для воды использовалась четырехточечная модель TIP4P/2005 [29], хорошо воспроизводящая экспериментальные значения коэффициентов вязкости [30] и диффузии [31]. Она включает фиктивную заряженную частицу, несущую парциальный заряд атома кислорода и расположенную рядом с атомом кислорода на биссектрисе угла НОН.

#### Создание начальной конфигурации

Для генерации топологии молекулы сахарозы, а также значений атомных зарядов использовался веб-сервер LigParGen [32]. Расчеты проводились для вычислительных ячеек различного размера для исследования сходимости результатов. Моле-

кулярно-динамическая ячейка содержала 1–32 молекул сахарозы и 171–5480 молекул воды в зависимости от запуска. Во всех расчетах массовая доля сахарозы в растворе составляла 10%. Начальное расположение молекул в ячейке задавалось с помощью программы Packmol [33] случайным образом так, чтобы расстояние между атомами разных молекул составляло более 2 Å (рис. 1).

*Метод молекулярной динамики.* Для моделирования использовался программный пакет Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [35–37]. Подготовка входных файлов для LAMMPS осуществлялась с использованием программы Moltemplate [38]. Расчет начинался с вывода системы на нужные давление и температуру при помощи баростата и термостата Нозе–Гувера [39–41]. После установления равновесия в изотермическом-изобарическом ансамбле (NPT) рассчитывалась равновесная плотность, при которой происходило вычисление требуемых параметров в каноническом (NVT) ансамбле. Во всех запусках использовался шаг по времени, равный 1 фс. Для избегания поверхностных эффектов применялись периодические граничные условия. Кроме того, учитывались поправки к расчету давления и энергии, компенсирующие обрезку потенциала [42]. Потенциал Леннарда-Джонса обрезался на расстоянии 12.5 Å, потенциал электростатического взаимодействия — на 12 Å. Дальнедействующая часть кулоновского потенциала рассчитывалась методом частица–частица–сетка [43].

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

### Плотность раствора

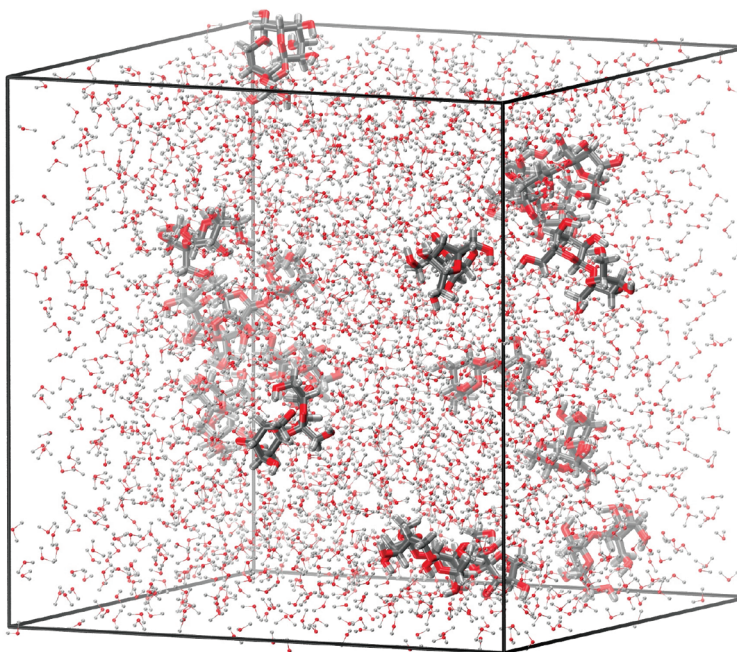
В диапазоне температур от 273 до 343 К была рассчитана равновесная плотность системы. На рис. 2 представлены полученные значения в сравнении с экспериментальными данными [24]. С ростом температуры возникает расхождение между экспериментальной кривой и рассчитанными значениями плотности. Полученные точки оказываются ниже кривой, однако в рассматриваемом диапазоне температур отклонение не превышает  $3 \times 10^{-3}$  г/см<sup>3</sup>, что составляет 0.3%.

### Коэффициент вязкости

Ключевой метод расчета коэффициентов вязкости в равновесной молекулярной динамике — метод Грина–Кубо [44, 45]. Значение коэффициента сдвиговой вязкости определяется из следующего соотношения:

$$\eta = \frac{V}{kT} \int_0^{\infty} C_s dt, \quad (1)$$

где  $V$  — объем расчетной ячейки,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура систе-



**Рис. 1.** Пример расчетной ячейки водного раствора сахарозы с массовой долей 10%, включающей 16 молекул сахарозы и 2736 молекул воды. Визуализация выполнена в пакете Visual Molecular Dynamics (VMD) [34].

мы, а  $C_{\sigma}$  – автокорреляционная функция недиагональных элементов тензора напряжений:

$$C_{\sigma} = \langle \sigma_{\alpha\beta}(0)\sigma_{\alpha\beta}(t) \rangle.$$

Угловые скобки означают усреднение по ансамблю и трем взаимно-перпендикулярным плоскостям  $xy$ ,  $xz$ ,  $yz$ . Тензор напряжений  $\sigma_{\alpha\beta}$  рассчитывается по формуле:

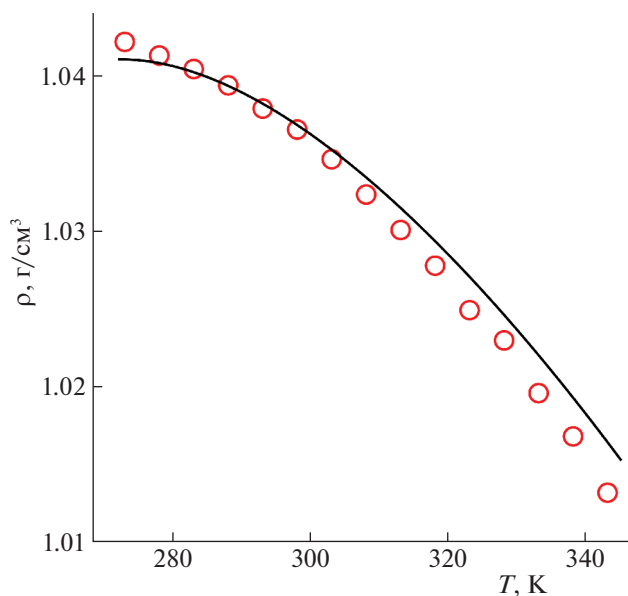
$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left( \sum_{i=1}^N m_i v_{i,\alpha} v_{i,\beta} + \sum_{i=1}^N r_{i,\alpha} f_{i,\beta} \right),$$

где  $f_{i,\beta}$  –  $\beta$ -компонента силы, действующей на  $i$ -ю частицу,  $N$  – количество атомов системы,  $N'$  – количество атомов системы и ближайшего образа в случае периодических граничных условий.

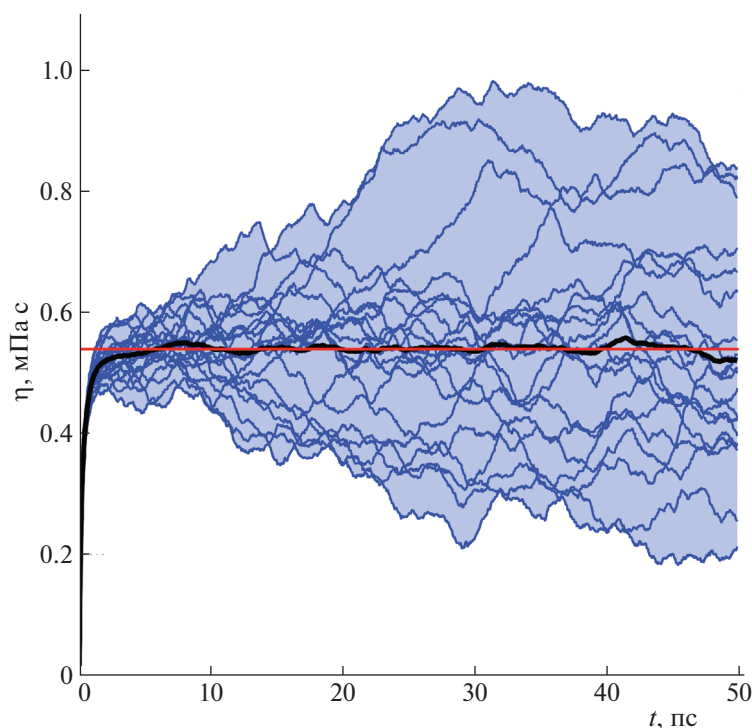
Зависимость среднего значения интеграла (уравнение (1)) от верхнего предела при температуре 338 К представлена на рис. 3. Значение коэффициента вязкости раствора определялось по выходу интеграла на плато. Усредненные по 20 запускам (зависимости показаны синим на рис. 3) данные представлены на рис. 4 в сравнении с экспериментальными значениями [23, 25]. Можно заметить расхождение экспериментальных точек работы [23] с экспериментальной кривой из работы [25]. Кривая лежит выше и особенно сильно отстает от точек при высоких температурах (отличие 21% при температуре 343 К). Рассчитанные точки отступают от экспериментальных не более

чем на 20%, а от экспериментальной кривой – не более чем на 9%.

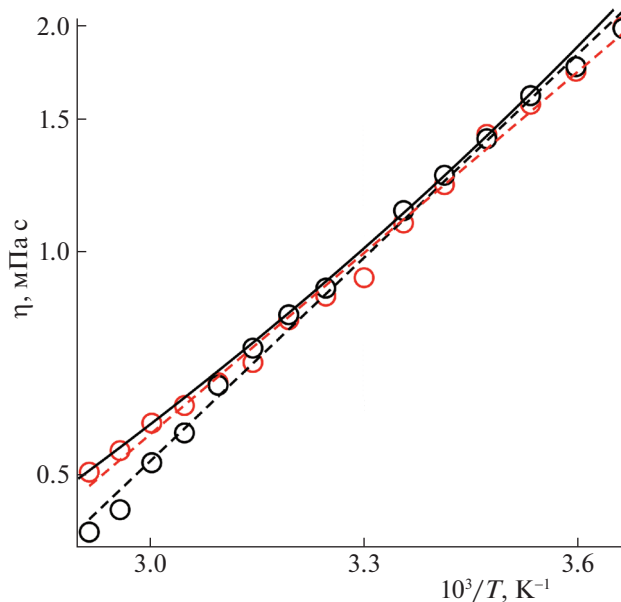
Коэффициент вязкости раствора чувствителен к температуре. Обратная к нему величина, называемая подвижностью, подчиняется уравнению



**Рис. 2.** Температурная зависимость плотности водного раствора сахарозы. Красными кружками обозначены значения, полученные методом молекулярной динамики в данной работе. Черной линией – экспериментальная кривая из работы [24].



**Рис. 3.** Зависимость интеграла Грина–Кубо автокорреляционной функции недиагональных элементов тензора напряжений от времени при температуре 338 К. Черная кривая – среднее значение, синие кривые – результаты расчетов для статистически независимых траекторий, красная линия – итоговое значение коэффициента вязкости.



**Рис. 4.** Температурная зависимость вязкости водного раствора сахарозы. Красными кругами обозначены значения, полученные методом молекулярной динамики, черными – экспериментальные данные [23]. Сплошной линией изображена экспериментальная кривая из работы [25]. Пунктирными линиями показаны аппроксимации точек уравнением Аррениуса (уравнение (2)).

Аррениуса. Таким образом, температурную зависимость коэффициента вязкости раствора можно описать следующим уравнением типа Аррениуса:

$$\eta = \eta_0 \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right), \quad (2)$$

где  $E_a$  – энергия активации,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – абсолютная температура системы,  $\eta_0$  – предэкспоненциальный множитель. Путем линейной аппроксимации зависимости  $\eta(1/T)$  в логарифмическом масштабе были получены значения коэффициентов уравнения (2).

Экспериментальная кривая в работе [23] получена в модели Фогеля–Фулчера–Таммана [46–48], которая используется для описания вязкости жидкостей в переохлажденном режиме. Уравнение имеет следующий вид:

$$\eta = \eta_0 \exp\left(\frac{B}{T - T_0}\right),$$

где  $T_0$  – предельная температура идеального стеклования,  $B$  – активационный барьер, а  $\eta_0$  – предэкспоненциальный множитель. Из кривой были получены точки и проведена их аппроксимация уравнением (2) для получения характерных значений  $E_a$  и  $\eta_0$  в рассматриваемом диапазоне температур. Полученные данные приведены в табл. 1.

*Коэффициент самодиффузии сахарозы*

Для расчета коэффициента самодиффузии компонента раствора используется формула Эйнштейна–Смолуховского, описывающая зависимость среднеквадратичного смещения молекул от времени:

$$\langle [\vec{r}_{i,a}(t) - \vec{r}_{i,a}(0)]^2 \rangle = 6D_a t, \quad (3)$$

где  $D_a$  – коэффициент самодиффузии компонента  $a$  в растворе,  $\vec{r}_{i,a}(t) - \vec{r}_{i,a}(0)$  – вектор смещения  $i$ -й молекулы компонента  $a$  из начального положения за время  $t$ ,  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по ансамблю.

Для увеличения точности определения коэффициента самодиффузии производилось дополнительное усреднение временной зависимости среднеквадратичного смещения по независимым траекториям. Для этого в качестве нулевого момента принимались различные моменты  $t_j$  и рассчитывались смещения молекул относительно того положения, которое они занимали ( $\vec{r}_{ai}(t_j)$ ). Поведение зависимости среднеквадратичного смещения молекул сахарозы от времени для системы, содержащей 32 молекулы сахарозы и 5480 молекул воды при температуре 313 К представлено на рис. 5.

Путем аппроксимации линейного участка зависимости среднеквадратичного отклонения центров масс молекул сахарозы от времени в двойном логарифмическом масштабе, а также использования уравнения (3), были получены коэффициенты самодиффузии сахарозы в растворе. Использование периодических граничных условий приводит к зависимости коэффициента самодиффузии от конечного размера системы, возникающей из-за коллективных течений [49] и описываемой следующей формулой [50–53]:

$$D_{md} = D_\infty - \frac{kT\xi}{6\pi\eta L}, \quad (4)$$

где  $D_{md}$  – коэффициент самодиффузии, полученный из молекулярно-динамического расчета,  $D_\infty$  – коэффициент самодиффузии в пределе бесконечного размера системы,  $L$  – длина ребра кубической расчетной ячейки,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура системы,  $\eta$  – коэффициент вязкости, а  $\xi$  – безразмерная постоянная.

Зависимость  $D_{md}(1/L)$  при температуре 308 К представлена на рис. 6. Аппроксимацией было найдено значение размерной поправки, что позволило учесть размерный эффект во всем диапазоне температур. Температурная зависимость коэффициентов диффузии представлена на рис. 7 для двух размеров системы. Первая система содержала 4 молекулы сахарозы и 685 молекул воды, а вторая – 32 и 5480. На график также нанесены

**Таблица 1.** Значения параметров предэкспоненциального множителя  $\eta_0$  и энергии активации  $E_a$ , полученные аппроксимацией зависимости  $\eta(1/T)$  в данной работе и экспериментах [23, 25]

Метод	$\eta_0 \times 10^3$ , мПа с	$E_a$ , кДж/моль
МД	$2.11 \pm 0.27$	$15.5 \pm 0.3$
Эксперимент [23]	$0.98 \pm 0.13$	$17.4 \pm 0.3$
Эксперимент [25]	$1.78 \pm 0.15$	$16.0 \pm 0.2$

значения с поправкой на размерные эффекты, а также экспериментальные данные.

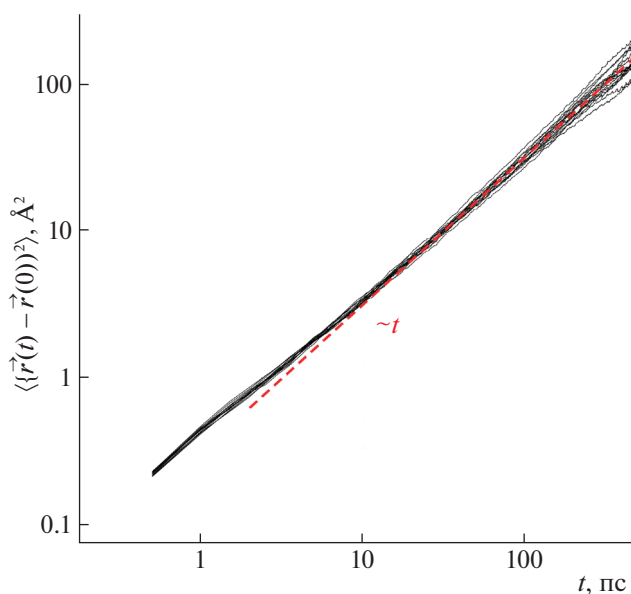
Температурная зависимость коэффициента самодиффузии подчиняется уравнению Аррениуса:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right). \quad (5)$$

Путем линейной аппроксимации зависимости коэффициента самодиффузии от обратной температуры в логарифмическом масштабе были получены значения коэффициентов уравнения (5). Экспериментальная кривая в работе [23] получена в модели Фогеля–Фулчера–Таммана и имеет следующий вид:

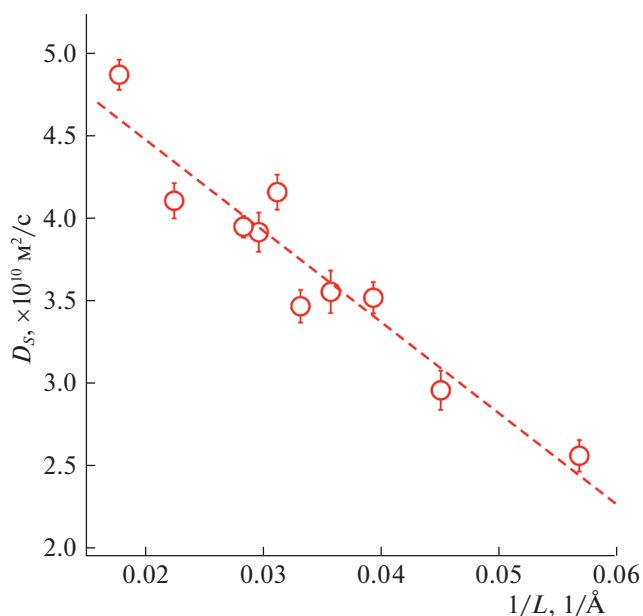
$$D = D_0 \exp\left(-\frac{B}{T - T_0}\right),$$

где  $T_0$  – предельная температура идеального стеклования,  $B$  – активационный барьер, а  $D_0$  – предэкспоненциальный множитель. Из кривой были получены точки и проведена их аппроксимация



**Рис. 5.** Зависимости среднеквадратичного отклонения центров масс молекул от времени при температуре 313 К в системе, содержащей 32 молекулы сахарозы и 5480 молекул воды.





**Рис. 6.** Зависимость коэффициента самодиффузии сахарозы в водном растворе от обратного размера расчетной ячейки при температуре 308 К.

уравнением (5) для получения характерных значений  $E_a$  и  $D_0$  в рассматриваемом диапазоне температур. Полученные данные приведены в табл. 2.

#### Гидродинамический радиус

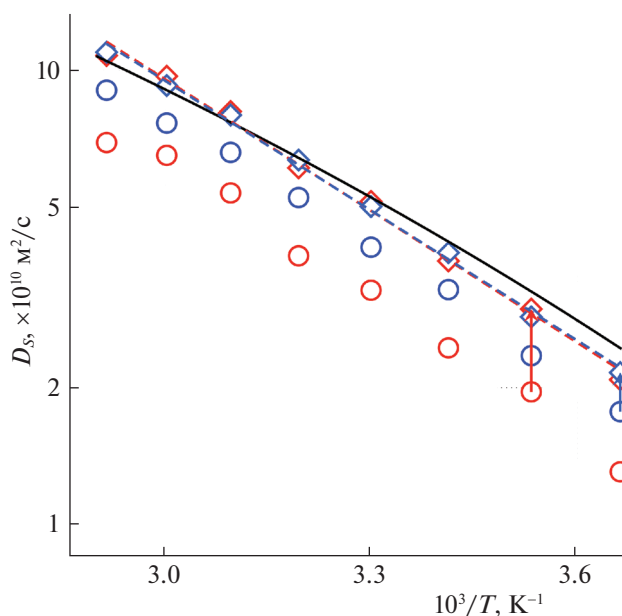
Знание коэффициентов вязкости и диффузии позволяют определить не только транспортные свойства растворенного вещества, но и структурные характеристики. В предположении о сферической форме молекулы сахарозы можно получить связь диффузии и вязкости с эффективным размером молекулы [54, 55]. Эта зависимость — уравнение Стокса–Эйнштейна — имеет следующий вид:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta R_h},$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура системы,  $\eta$  — коэффициент вязкости,  $R_h$  — эффективный радиус молекулы, называемый гидродинамическим радиусом. Для нахождения радиуса была исследована величина  $D\eta/T$ . Ее значение было вычислено при несколь-

**Таблица 2.** Значения параметров  $D_0$  и  $E_a$  уравнения (5), полученные путем аппроксимации зависимости  $D(1/T)$

Метод	$D_0 \times 10^7, \text{m}^2/\text{c}$	$E_a, \text{кДж/моль}$
МД	$6.9 \pm 1.1$	$18.2 \pm 0.4$
Эксперимент [25]	$3.1 \pm 0.4$	$16.1 \pm 0.3$



**Рис. 7.** Температурная зависимость коэффициента самодиффузии сахарозы в водном растворе. Красными кружками обозначены значения для системы, содержащей 4 молекулы сахарозы и 685 молекул воды, а синими — для системы, включающей 32 и 5480 молекул сахарозы и воды соответственно. Ромбами обозначены значения коэффициента диффузии с учетом размерного эффекта, а стрелки отражают значение поправки на размер системы, полученной из уравнения (4). Черная сплошная — экспериментальная кривая из работы [25], пунктир — аппроксимация точек уравнением (5).

ких температурах и получено среднее значение, из которого, в свою очередь, была найдена величина гидродинамического радиуса молекулы сахарозы в воде. Полученное значение гидродинамического радиуса в сравнении с экспериментом приведено в табл. 3.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследована молекулярно-динамическая (МД) модель водного раствора сахарозы. Вычислены температурные зависимости плотности раствора, коэффициента самодиффузии сахарозы методом Эйнштейна–Смолуховского, и вязкости раствора методом Грина–Кубо. Полученные в результате расчета значения равновесной плотности раствора сахарозы совпадают с экспериментом с точностью до 0.3% во всем исследуемом диапазоне температур. Рассчитанная зависимость  $\rho(T)$  спадает быстрее по сравнению с экспериментальной, что может привести к ощутимым различиям плотности при более высоких температурах.

Полученные значения сдвиговой вязкости воспроизводят эксперимент, отличие не превышает 20% в исследуемом интервале температур.

**Таблица 3.** Значения гидродинамического радиуса молекулы сахарозы, полученные в рамках МД-расчетов в данной работе, а также оценка из экспериментальных данных для диффузии и вязкости [25]

Метод	$R_h, \text{Å}$
МД	$4.56 \pm 0.04$
Эксперимент [25] ( $273 \text{ K} < T < 343 \text{ K}$ )	3.8–4.6

Такое расхождение может быть связано со сложностью определения вязкости раствора при высоких температурах в экспериментальной методике. В эксперименте [23] при измерении двумя различными способами отличие в значениях вязкости составляет более 3% уже при температуре 308 К. Расхождение между экспериментами [23] и [25] составляет до 21%.

Для коэффициента диффузии был исследован размерный эффект, возникающий из-за использования периодических граничных условий. Учет поправки на размер вычислительной ячейки позволяет достичь сходимости результатов расчета с экспериментальной кривой в пределах 12%.

Температурные зависимости коэффициентов вязкости и диффузии аппроксимированы уравнением Аррениуса. Получены энергии активации и предэкспоненциальные множители. Энергия активации для коэффициента вязкости из МД составляет  $15.5 \pm 0.3$  кДж/моль, что достаточно близко к эксперименту –  $16.0 \pm 0.2$  кДж/моль [25]. Для коэффициента самодиффузии сахарозы отличие энергий активации составляет 13% (в данной работе  $18.2 \pm 0.4$  кДж/моль и в эксперименте  $16.1 \pm 0.3$  кДж/моль).

Дополнительно проведены оценки гидродинамического радиуса молекулы через рассчитанные коэффициенты вязкости и диффузии. Полученное значение  $4.56 \pm 0.04 \text{ Å}$  лежит в экспериментальном диапазоне 3.8–4.6 Å, что дополнительно верифицирует построенную МД-модель.

Таким образом, силовое OPLS-AA с коррекцией парциальных зарядов 1.14\*CM1A на атомах в комбинации с TIP4P/2005 достаточно аккуратно воспроизводит температурные зависимости плотности, вязкости и диффузии для водного раствора сахарозы с массовой долей сахарозы 10%.

Расчёты проведены на суперкомпьютерах “Демос” и “Фишер” ОИВТ РАН. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда по гранту № 18-19-00734 (В. Дещеня: расчеты, анализ результатов, написание основного текста статьи; А. Ланкин: постановка задачи, обзор литературы; Г. Норман: анализ результатов и структура статьи) и Программой Министерства науки и высшего образования № 075-00460-21-00 (Н.

Кондратюк: методики расчета, обзор литературы, выбор потенциала).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tolstoguzov V. // Food Hydrocoll. 2004. V. 18. № 5. P. 873.
2. Rendueles O., Kaplan J.B., Ghigo J.M. // Environ. Microbiol. 2012. V. 15. № 2. P. 334.
3. Shuo Liu, Li Hu, Wei Zhang, Hong Ma // Non-Metallic Material Science. 2019. V. 1. № 2.
4. Barakat M.A. // J. Environ. Sci. Tech. 2008. V. 1. № 3. P. 151.
5. Arthanareeswaran G., Thanikaivelan P., Jaya N. et al. // J. Hazard. Mater. 2007. V. 139. № 1. P. 44.
6. Petrov S., Nenov V. // Desalination. 2004. V. 162. P. 201.
7. Trivunac K., Stevanovic S. // Chemosphere. 2006. V. 64. № 3. P. 486.
8. Janoschka T., Martin N., Martin U. et al. // Nature. 2015. V. 527. № 7576. P. 78.
9. Гурина Д.Л., Антюпова М.Л., Петренко В.Е. // Журн. физ. химии. 2011. Т. 85. № 5. С. 885.
10. Антюпова М.Л., Петренко В.Е. // Там же. 2013. Т. 87. № 7. С. 1196.
11. Ланкин А.В., Норман Г.Э., Орехов М.А. // Там же. 2016. Т. 90. № 5. С. 710.
12. Orekhov N., Kondratyuk N., Logunov M. et al. // Cryst. Growth Des. 2021. V. 21. № 4. P. 1984.
13. Gupta A.K. // Mater. Today Proc. 2021. V. 44. P. 2380.
14. Min Zhou, Ke Cheng, Guo-zhu Jia // J. Mol. Liq. 2017. V. 230. P. 137.
15. Раззоков Д., Исмаилова О.Б., Маматкулов Ш.И. и др. // Журн. физ. химии. 2014. Т. 88. № 9. С. 1339.
16. Ewen J., Gattinoni C., Thakkar F. et al. // Materials. 2016. V. 9. № 8. P. 651.
17. Glova A.D., Volgin I.V., Nazarychev V.M. et al. // RSC Adv. 2019. V. 9. № 66. P. 38834.
18. Orekhov N., Ostroumova G., Stegailov V. // Carbon. 2020. V. 170. P. 606–620.
19. Nazarychev V.M., Glova A.D., Volgin I.V. et al. // Int. J. Heat Mass Transf. 2021. V. 165. P. 120639.
20. Darros-Barbosa R., Balaban M.O., Teixeira A.A. // Int. J. Food Prop. 2003. V. 6. № 2. P. 195.
21. Quintas M., Brandão T.R.S., Silva C.L.M., Cunha R.L. // J. Food Eng. 2006. V. 77. № 4. P. 844.
22. Corti H.R., Frank G.A., Marconi M.C. // J. Solution Chem. 2008. V. 37. P. 1593.
23. Telis V.R.N., Telis-Romero J., Mazzotti H.B., Gabas A.L. // Int. J. Food Prop. 2007. V. 10. № 1. P. 185.
24. Wagenbreth H., Toth H., Kozdon A., Emmerich A. // 1988. V. 98. № 2. P. 198.
25. Rampp M., Buttersack C., Lüdemann H.D. // Carbohydr. Res. 2000. V. 328. № 4. P. 561.
26. Jorgensen W.L., Maxwell D.S., Tirado-Rives J. // J. Am. Chem. Soc. 1996. V. 118. № 45. P. 11225.
27. William J.L., Tirado-Rives J. // Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2005. V. 102. № 19. P. 6665.

28. *Dodda L.S., Vilseck J.Z., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L.* // *J. Phys. Chem. B.* 2017. V. 121. № 15. P. 3864.
29. *Abascal J.L.F., Vega C.* // *J. Chem. Phys.* 2005. V. 123. № 23. P. 234505.
30. *Gonzalez M.A., Abascal J.L.F.* // *J. Chem. Phys.* 2010. V. 132. № 9. P. 096101.
31. *Vega C., Abascal J.L.F., Conde M.M., Aragonés J.L.* // *Faraday Discuss.* 2009. V. 141. P. 251.
32. *Dodda L.S., Cabeza de Vaca I., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L.* // *Nucleic Acids Res.* 2017. V. 45. № W1. P. W331.
33. *Martínez L., Andrade R., Birgin E.G., Martínez J.M.* // *J. Comput. Chem.* 2009. V. 30. № 13. P. 2157.
34. *Humphrey W., Dalke A., Schulten K.* // *J. Molec. Graphics.* 1996. V. 14. P. 33.
35. *Plimpton S.* // *J. Comput. Phys.* 1995. V. 117. № 1. P. 1.
36. *Brown W.M., Wang P., Plimpton S.J., Tharrington A.N.* // *Comput. Phys. Commun.* 2011. V. 182. № 4. P. 898.
37. *Brown W.M., Kohlmeyer A., Plimpton S.J., Tharrington A.N.* // *Comput. Phys. Commun.* 2012. V. 183. № 3. P. 449.
38. *Jewett A.I., Stelter D., Lambert J. et al.* // *J. Mol. Biol.* 2021. V. 433. № 11. P. 166841.
39. *Nose S.* // *Mol. Phys.* 1984. V. 52. № 2. P. 255.
40. *Hoover W.G.* // *Phys. Rev. A.* 1985. V. 31. P. 1695.
41. *Shinoda W., Shiga M., Mikami M.* // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 69. P. 134103.
42. *Sun H.* // *J. Phys. Chem. B.* 1998. V. 102. № 38. P. 7338.
43. *Hockney R.W., Eastwood J.W.* // *Particle-Particle-Particle-Mesh (P3M) Algorithms. Computer Simulation Using Particles.* Bristol, PA, USA: Taylor & Francis, 1988. P. 267–304.
44. *Green M.S.* // *J. Chem. Phys.* 1954. V. 22. № 3. P. 398.
45. *Kubo R.* // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1957. V. 12. № 6. P. 570.
46. *Vogel H.* // *T Phys. Z.* 1921. V. 22. P. 645.
47. *Fulcher G.S.* // *J. Am. Ceram. Soc.* 1925. V. 8. № 6. P. 339.
48. *Tammann G., Hesse W.* // *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie.* 1926. V. 156. № 1. P. 245.
49. *Anikeenko A.V., Malenkov G.G., Naberukhin Yu.I.* // *J. Chem. Phys.* 2018. V. 148. P. 094508.
50. *Yeh In-Chul, Gerhard H.* // *J. Phys. Chem. B.* 2004. V. 108. № 40. P. 15873.
51. *Jamali S.H., Wolff L., Becker T.M. et al.* // *J. Chem. Theory Comput.* 2018. V. 14. № 5. P. 2667.
52. *Orekhov M.A.* // *J. Mol. Liq.* 2021. V. 322. P. 114554.
53. *Волков Н.А., Посысоев М.В., Шекин А.К.* // *Колл. журн.* 2018. Т. 80. № 3. С. 264.
54. *Gordon P.A.* // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2005. V. 44. № 15. P. 5828.
55. *Kondratyuk N., Lenev D., Pisarev V.* // *J. Chem. Phys.* 2020. V. 152. P. 191104.