

УДК 532.74

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ, ДИНАМИЧЕСКИХ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ ВОДНОГО РАСТВОРА NaNO_2

© 2022 г. Е. В. Тарарушкин^{a,*}

^aМеждународная лаборатория суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа НИУ ВШЭ, Москва, Россия

*e-mail: evgeny.tararushkin@yandex.ru

Поступила в редакцию 05.01.2022 г.

После доработки 05.01.2022 г.

Принята к публикации 11.01.2022 г.

С помощью метода классической молекулярной динамики проведено исследование свойств водного раствора NaNO_2 на основе вновь выполненной параметризации потенциала взаимодействия иона NO_2^- с молекулами воды. Показано, что первая гидратная оболочка вокруг иона NO_2^- имеет радиус не менее 3.8 \AA и наиболее слабые водородные связи возникают между молекулами H_2O и атомом азота иона NO_2^- . Из-за более слабых водородных связей времена ориентационной релаксации у ионов NO_2^- в растворе имеют меньшие значения, чем у молекул H_2O . Коэффициент самодиффузии NO_2^- оказался больше, чем коэффициент самодиффузии Na^+ , что согласуется с экспериментальными данными. Колебательные свойства гидратированного иона NO_2^- , исследованные с помощью спектра мощности колебаний атомов, показали небольшие отклонения от экспериментальных данных.

Ключевые слова: водный раствор NaNO_2 , структурные, динамические и колебательные свойства, водородные связи, классическая молекулярная динамика

DOI: 10.31857/S0044453722070317

Гидратированный ион нитрита, NO_2^- , достаточно широко распространен в природе, он встречается в продуктах питания и питьевой воде [1]. Также водный раствор нитрита натрия, NaNO_2 , имеет широкое применение в различных областях промышленности. В частности, его применяют в сфере производства бетонных и железобетонных конструкций в качестве противоморозной добавки, а также ингибитора коррозии стальной арматуры в железобетонных конструкциях [2, 3]. Для прогнозирования долговременных свойств бетонных и железобетонных конструкций, имеющих в своем составе добавку NaNO_2 , необходимо понимать свойства водного раствора NaNO_2 и механизмы его взаимодействия с цементными минералами на фундаментальном атомистическом уровне. Метод классической молекулярной динамики (МД) как раз позволяет получать информацию о свойствах водных растворов и растворенных в них ионах на таком уровне детализации.

Для атомистического моделирования глинистых и цементных материалов и их взаимодей-

ствия с водными растворами методом МД в последние 15–20 лет широко применяется силовое поле ClayFF [4, 5], которое обладает простотой и гибкостью в применении, но позволяет в то же время моделировать различные свойства материалов в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными [6]. В данной работе мы предлагаем новую параметризацию потенциала взаимодействия иона нитрита с молекулами воды и гидратированными поверхностями для дальнейшего его применения совместно с силовым полем ClayFF при моделировании взаимодействия водных растворов нитрита с цементными материалами. В качестве основы для параметризации используется недавно полученные результаты расчетов методом теории функционала электронной плотности (DFT) иона нитрита растворенного в воде [7, 8]. Используя вновь полученные параметры для NO_2^- мы, с помощью метода МД, исследуем структурные, динамические и колебательные свойства водного раствора NaNO_2 , в том числе количественно оцениваем свой-

Таблица 1. Параметры для ван-дер-ваальсового и кулоновского взаимодействий для NO_2^-

Атом	$\sigma_{ii}, \text{Å}$	$\epsilon_{ii}, \text{кКал/моль}$	q_i, e
On	3.2455	0.1554	-0.485
N	3.2610	0.2000	-0.030

ства и поведение водородных связей в первой гидратной оболочке ионов.

МЕТОДЫ И МОДЕЛИ ИССЛЕДОВАНИЯ

Потенциальная энергия системы взаимодействующих частиц моделируемых силовым полем ClayFF описывается следующей формулой [6]:

$$E_{Pot} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \sum_{i \neq j} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum_{ij \text{ bonded}} k_{r,ij} (r_{ij} - r_{o,ij})^2 + \sum_{ijk \text{ bonded}} k_{\theta,ijk} (\theta_{ijk} - \theta_{o,ijk})^2, \quad (1)$$

где первое слагаемое описывает кулоновское взаимодействие между частицами; второе слагаемое описывает ван-дер-ваальсовое взаимодействие; последние два члена описывают внутримолекулярные взаимодействия между атомами в гармоническом приближении.

Для моделирования методом МД согласно формуле (1) для молекул H_2O были приняты параметры в соответствии с моделью SPC/E [9], заряд и параметры потенциала Леннард-Джонса для гидратированного иона Na^+ принимались из модели ClayFF [6]. Для иона NO_2^- , как было сказано выше, были заново оценены частичные заряды на атомах и параметры потенциала Леннард-Джонса для атомов азота и кислорода (далее N и On соответственно) на основе сопоставления радиальных функций распределения для пар N–Ow, N–Hw(Dw), On–Ow и On–Hw(Dw) (где Ow – кислород молекулы $\text{H}_2\text{O}(\text{D}_2\text{O})$, Hw(Dw) – водород/дейтерий молекулы $\text{H}_2\text{O}(\text{D}_2\text{O})$) по результатам DFT-расчетов [7, 8]. Также, ориентируясь на данные рамановской спектроскопии [10], были определены величины упругих констант связей N–On и равновесных значений угла On–N–On для описания внутримолекулярных взаимодействий в ионе NO_2^- . Вновь полученные данные для иона NO_2^- указаны в табл. 1, 2.

Для получения и исследования структурных и динамических свойств водного раствора NaNO_2 была построена кубическая ячейка размером $\sim 49 \times 49 \times 49 \text{ Å}^3$. Общее число атомов в ячейке составило 12256: по 16 ионов Na^+ и NO_2^- на 4064 молекулы H_2O , что в итоге дало моляльность водного раствора $\sim 0.22 \text{ M}$. Такая концентрация примерно соответствует экспериментально измеренным составам растворов в порах цементных бетонов [2].

Все расчеты методом МД проводились с помощью пакета LAMMPS [11] с применением периодических граничных условий. Классические уравнения движения численно интегрировались по алгоритму Верле [12] с временным шагом 1 фс. Радиус обрезания короткодействующих взаимодействий составлял 12.5 Å , а для учета дальнедействующих электростатических взаимодействий применялся метод Эвальда [12]. Параметры потенциала Леннард-Джонса между разными по природе атомами вычислялись по арифметическому правилу Лоренца–Бертло [6]. Построенная модель сначала приводилась к термодинамическому равновесию при нормальных условиях ($T = 298 \text{ K}$, $P = 1 \text{ бар}$) с применением термобаростата Нозе–Гувера для статистического NPT -ансамбля [12], затем равновесный расчет проводился в NVT -ансамбле. Длина МД-траекторий составляла 1 нс для каждого типа ансамблей.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Плотность водного раствора NaNO_2 после уравнивания в NPT -ансамбле составила 1.042 г/см^3 , тогда как плотность чистой воды (модель SPC/E) при тех же условиях моделирования составила 0.997 г/см^3 . В работе [7] расчет методом DFT одного иона нитрита среди 496 молекул воды проводился при плотности раствора 0.997 г/см^3 .

Для исследования структурных свойств раствора NaNO_2 были получены радиальные функции распределения, $g(r)$, для следующих пар частиц: N–Ow, N–Hw, On–Ow, On–Hw, а также Na–N, Na–On и Na–Ow. На рис. 1 показаны радиальные функции распределения для иона нитрита и молекул воды. Для пары N–Ow первый максимум функции расположен на расстоянии 3.19 Å , что отличается от позиции первого максимума полученного методом DFT ($\sim 3.5 \text{ Å}$) в работах [7, 8]. Первый же минимум для данной пары

Таблица 2. Упругие константы и равновесные расстояние и угол для N–On и On–N–On

АТОМ		$k_r,$ кКал/(моль Å^2)	$r_0, \text{Å}$	АТОМ			$k_\theta,$ кКал/(моль рад 2)	$\theta_0, \text{град}$
i	j			i	j	k		
On	N	396.536	1.2539	On	N	On	293.589	116.80

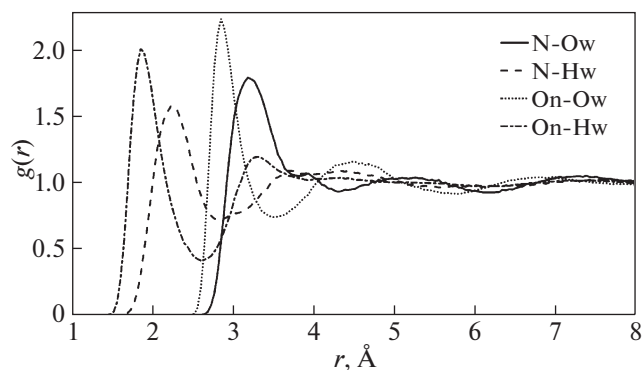


Рис. 1. Радиальные функции распределения для пар N–Ow, N–Hw, On–Ow, On–Hw.

частиц на графике наблюдается на расстоянии 3.81 Å, что также отличается от результатов полученных методом DFT (~4.0 Å [8] и ~4.4 Å [7]), но при этом наблюдается также и расхождение такого ж порядка между двумя расчетами DFT [7, 8]. Для пары N–Hw также наблюдается различие в положении пиков полученной радиальной функции распределения по сравнению с результатами из DFT-расчетов. Так первый максимум функции для метода МД расположен на расстоянии 2.31 Å, что отличается от положения пиков из расчетов методом DFT (~2.6 Å [8] и ~3.0 Å [7]). Первый минимум радиальной функции распределения для рассматриваемой пары для метода МД из настоящего исследования расположен на расстоянии 2.90 Å, что также отличается от положения первого минимума (~3.6 Å) из работы [7], но лишь немного отличается от результата из работы [8] (~3.1 Å). Такое расхождение между результатами МД-моделирования и DFT-расчетов, несмотря на новую параметризацию на основе DFT-расчетов, можно объяснить тем, что при новой параметризации мы подбирали параметры ван-дер-ваальсовых радиусов атомов азота и кислорода иона нитрита исходя, прежде всего из условия воспроизведения начального контактного радиуса сольватной оболочки. Кроме того, проблема заключается также в неравномерном распределении электронной плотности на молекуле иона нитрита за счет наличия неподеленной электронной пары на атоме азоте. Воспроизвести такую неравномерность электронной плотности для данного типа модели иона не представляется возможным в классическом методе МД без существенного усложнения модели и введения дополнительных параметров. Необходимо также учитывать наличие существенных разногласий между результатами DFT-расчетов двух независимых групп [7, 8], которое можно объяснить различным выбором обменно-корреляционных функционалов, поправок на дисперсионное взаимодействие, а также недостаточной статистикой усреднения

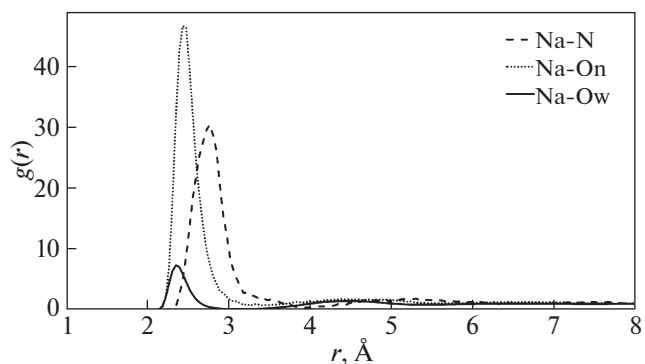


Рис. 2. Радиальные функции распределения для пар Na–N, Na–On и Na–Ow.

при расчетах всего одним ионом нитрита среди молекул воды. Такие разногласия не позволяют использовать результаты DFT-расчетов для параметризации классических потенциалов взаимодействия, в качестве безусловных количественных ориентиров.

Для пар On–Ow и On–Hw наблюдается лучшее совпадение позиции пиков радиальных функций распределения из метода МД с позициями пиков из DFT-расчетов. Так первый максимум функции для пары On–Ow расположен на расстоянии 2.85 Å, что близко к позиции первого максимума (~2.8 Å) из работы [8] и немного дальше от позиции первого максимума (~3.1 Å) из работы [7]. Первый минимум функции из МД-расчета расположен на расстоянии 3.52 Å, что близко к первому минимуму (~3.6 Å) из работы [7] и немного дальше, чем первый минимум (~3.3 Å) из работы [8]. Для пары On–Hw первый максимум радиальной функции распределения для метода МД наблюдается на расстоянии 1.85 Å, что также близко к значениям положений первых максимумов (~1.8 Å [8] и ~2.0 Å [7]) из DFT-расчетов. Первый минимум функции для метода МД расположен на расстоянии 2.60 Å, что немного дальше по сравнению с положением минимума (~2.3 Å) из работы [8] и близок с положением минимума (~2.7 Å) из работы [7].

На рис. 2 показаны графики радиальной функции распределения для пар Na–N, Na–On и Na–Ow. Для пар Na–N и Na–On первые максимумы функций расположены на расстояниях 2.77 Å и 2.43 Å соответственно, а первые минимумы расположены на расстояниях 4.02 Å и 3.27 Å соответственно. Для пары Na–Ow первый максимум функции расположен на расстоянии 2.35 Å, а первый минимум расположен на расстоянии 3.15 Å, что схоже с результатами расчетов методом DFT и экспериментальными данными [13].

Также для понимания структурных и динамических свойств раствора было исследовано время жизни водородных связей между молекулами во-

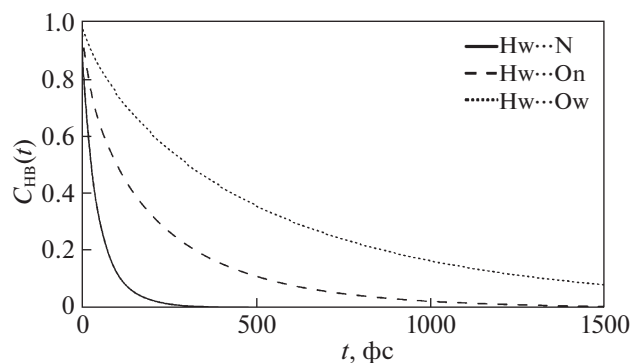


Рис. 3. Непрерывные (continuous) автокорреляционные функции водородных связей для пар $\text{Hw}\cdots\text{N}$, $\text{Hw}\cdots\text{On}$ и $\text{Hw}\cdots\text{Ow}$.

ды и ионом нитрита и их ориентационная релаксация. Для молекул воды водородная связь между донором и акцептором определялись с помощью наиболее распространенного геометрического критерия [14]: $R_{\text{OwOw}} \leq 3.5 \text{ \AA}$, $R_{\text{OwHw}} \leq 2.45 \text{ \AA}$, $\angle\text{HwOwOw} \leq 30$ град. Для донорно-акцепторных пар между молекулами воды и ионами нитрита расстояние между парами $\text{N}-\text{Hw}$ и $\text{On}-\text{Hw}$ принималось согласно работе [8]: $R_{\text{NHw}} \leq 2.25 \text{ \AA}$ и $R_{\text{OnHw}} \leq 2.35 \text{ \AA}$. Непрерывное (continuous) время жизни водородных связей, τ_{HB} , определялось через интегрирование автокорреляционной функции водородных связей, C_{HB} , [8, 14]. Графики автокорреляционной функции для донорно-акцепторных пар $\text{Hw}\cdots\text{N}$, $\text{Hw}\cdots\text{On}$ и $\text{Hw}\cdots\text{Ow}$ показаны на рис. 3. В табл. 3 приведены значения величин времени жизни водородных связей, а также указано среднее значение водородных связей, приходящихся на H_2O и акцепторы N и On .

Из рис. 3 и табл. 3 видно, что наименьшее время жизни наблюдается у донорно-акцепторной пары $\text{Hw}\cdots\text{N}$, что также наблюдается и в DFT-расчетах. При этом между методами МД и DFT наблюдается значительная разница, которую, в том числе, можно объяснить тем, что в работе [8] исследовался ион нитрита, растворенный в тяжелой воде. Наименьшее среднее число водородных связей наблюдается для пары $\text{Hw}\cdots\text{N}$, что также

соответствует результатам расчетов DFT-метода [7]. Большую разницу для числа водородных связей акцептора по сравнению с DFT-методом можно объяснить разницей в структурных свойствах раствора, а именно, положение первого максимума радиальной функции распределения для МД-метода расположено несколько ближе к центру атома N , чем у метода DFT. Для пары $\text{Hw}\cdots\text{On}$ уже наблюдается лучшее согласие среднего значения водородных связей между методом МД и DFT-методом, приходящихся на акцептор, что обусловлено более лучшим совпадением положения первых максимума и минимума радиальных функций распределения методов МД и DFT. Время жизни водородных связей для пары $\text{Hw}\cdots\text{On}$ для метода МД также меньше по сравнению с методом DFT, но расхождение уже меньше. Для пары $\text{Hw}\cdots\text{Ow}$ (молекулы воды) для метода МД наблюдаются стандартные среднее число водородных связей на молекулу воды и время жизни водородных связей [15].

Ориентационная релаксация ионов NO_2^- и молекул H_2O определялась помощью автокорреляционной функции поворота единичного вектора направленного вдоль связи $\text{N}-\text{On}/\text{Ow}-\text{Hw}$, C_2 , при вычислении которой использовался полином Лежандра 2-й степени [8]. Графики автокорреляционных функций для ионов NO_2^- и молекул H_2O показаны на рис. 4. Времена ориентационной корреляции определялись с помощью биэкспоненциальной аппроксимации [8]:

$$C_2(t) = A_1 \exp(-t/\tau_1) + A_2 \exp(-t/\tau_2). \quad (2)$$

Полученные времена релаксации составили следующие значения для иона NO_2^- : $\tau_1 = 0.13$ пс и $\tau_2 = 1.85$ пс. Время τ_1 обусловлено инерционными эффектами иона при повороте, а время τ_2 обусловлено переориентацией иона, которая включает в себя большие скачки углов поворота [8].

Значение времени τ_1 для иона NO_2^- несколько больше, чем время, полученное с помощью DFT-расчета ($\tau_1 = 0.07$ пс) [8], а время τ_2 , наоборот, меньше, чем значение в DFT-методе ($\tau_2 = 3.26$ пс) [8]. Эти различия можно объяснить различием в

Таблица 3. Среднее значение водородных связей на молекулу воды/акцептор иона нитрита, n_{HB} , и времена жизни водородных связей, τ_{HB}

Донорно-акцепторная пара	n_{HB} , шт.		τ_{HB} , пс	
	Наш расчет	Метод DFT [7]	Наш расчет	Метод DFT [8]
$\text{Hw}\cdots\text{N}$	1.52	0.5 ± 0.6	0.049	0.4
$\text{Hw}\cdots\text{On}$	2.74	2.05 ± 0.85	0.205	0.8
$\text{Hw}\cdots\text{Ow}$	3.53	—	0.539	2.35*

* Указано значение без учета сольватных оболочек воды у иона нитрита.

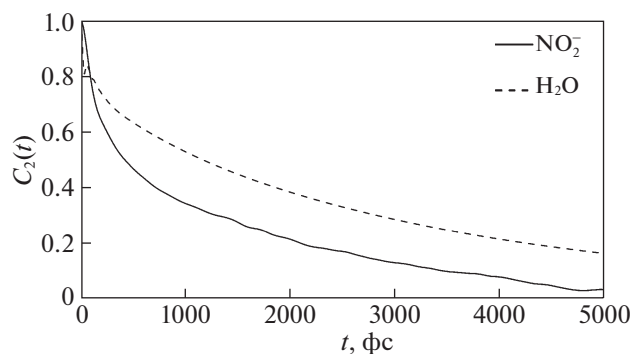


Рис. 4. Автокорреляционные функции ориентационной релаксации ионов NO_2^- и молекул H_2O .

расчетных значениях времен жизни водородных связей между молекулами воды и NO_2^- в методах МД и DFT, которые, в свою очередь, влияют на времена ориентационной релаксации иона NO_2^- . Для молекул H_2O наши расчеты показали следующие времена ориентационной релаксации: $\tau_1 = 0.35$ пс и $\tau_2 = 3.53$ пс. Эти значения превышают аналогичные значения для иона NO_2^- , что также обусловлено более продолжительным временем жизни водородных связей между молекулами воды.

Также для исследования динамических свойств раствора рассчитывались коэффициенты самодиффузии ионов Na^+ и NO_2^- и молекул H_2O . Для сравнения также определялся коэффициент самодиффузии молекул H_2O в чистой воде. Коэффициенты самодиффузии вычислялись через среднеквадратическое смещение атомов по соотношению Эйнштейна–Смолуховского [12, 16]. Для чистой воды коэффициент самодиффузии молекул H_2O составил $D_w^p = 1.75 \times 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$, тогда как для молекул H_2O в водном растворе NaNO_2 коэффициент самодиффузии ожидаемо оказался ниже и составил $D_w^n = 1.64 \times 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$. Оба вычисленных значения оказались меньше, чем экспериментальное значение $D_w^e = 2.30 \times 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ [17], эту разницу можно объяснить применением гибкой модели SPC/E для молекул H_2O . Коэффициент самодиффузии для иона NO_2^- составил $D_{\text{NO}_2^-} = 1.04 \times 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$, что меньше экспериментального значения $D_{\text{NO}_2^-}^e = 1.91 \times 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ [18]. Для иона Na^+ коэффициент самодиффузии составил $D_{\text{Na}^+} = 0.75 \times 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$, что также меньше, чем экспериментальное значение $D_{\text{Na}^+}^e = 1.33 \times 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ [18]. Меньшие значения коэффициентов самодиффузии ионов из МД по сравнению с эксперимен-

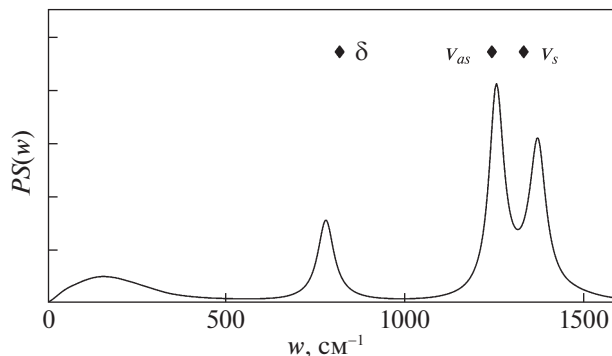


Рис. 5. Спектр мощности колебательных состояний ионов NO_2^- (сплошная линия), \blacklozenge – положение экспериментальных пиков.

тальными данными также можно объяснить применением гибкой модели молекул H_2O .

Колебательные свойства раствора исследовались с помощью спектров мощности колебательных состояний атомов, PS . Спектры вычислялись через косинус преобразование автокорреляционных функций скоростей атомов [12]. На рис. 5 показан спектр мощности колебательных состояний для иона NO_2^- из МД-моделирования, а также приведены положения пиков валентных симметричных, ν_s , ассиметричных, ν_{as} , и деформационных, δ , колебаний, полученных из рамановской спектроскопии [10]. Положение пика деформационных колебаний из МД-моделирования составило 780 см^{-1} , что несколько меньше, чем экспериментальное значение (817 см^{-1}). Также несколько отличается положение пиков валентных симметричных и ассиметричных колебаний, так положение пика валентных колебаний из МД-расчета составляет 1370 см^{-1} , а экспериментальное значение составляет 1331 см^{-1} . Для валентного ассиметричного колебания положение пика составляет 1255 см^{-1} для метода МД, тогда рамановская спектроскопия показала 1242 см^{-1} .

Таким образом, вновь выполненная параметризация гидратированного иона NO_2^- позволила заново исследовать структурные, динамические и колебательные свойства водного раствора NaNO_2 с помощью метода классической молекулярной динамики и произвести сравнение полученных результатов с результатами расчетов методом DFT и экспериментальными данными.

В итоге установлено, что первая гидратная оболочка вокруг иона NO_2^- имеет радиус не менее 3.81 \AA , а вокруг иона Na^+ имеет радиус 3.15 \AA . Водородные связи в гидратной оболочке вокруг иона NO_2^- молекулы H_2O создают как с атомом азота NO_2^- , так и с атомом кислорода NO_2^- . При-

чем наименьшее число водородных связей, входящих на акцептор, как и меньшее время жизни водородных связей, наблюдаются между молекулами H_2O и атомом азота NO_2^- . Времена ориентационной релаксации для иона NO_2^- показали меньшие значения, чем для молекулы H_2O , что обусловлено более слабыми водородными связями вокруг иона NO_2^- . Коэффициент самодиффузии иона Na^+ оказался меньше, чем коэффициент иона NO_2^- , что качественно совпадает с экспериментом. Положение пиков вычисленного спектра мощности колебательных состояний растворенного иона NO_2^- показало лишь небольшие отклонения от положения пиков из рамановской спектроскопии.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ в 2019–2022 годах. Исследование выполнено с использованием суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ [19]. Автор выражает благодарность своему научному руководителю А.Г. Калининцеву за ценные советы при выполнении данной работы и В.В. Писареву за консультации при реализации вычислений некоторых свойств растворов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Yadav S., Chandra A.* // J. Comput. Chem. 2020. 41 (20). P. 1850.
<https://doi.org/10.1002/jcc.26356>
2. *Tritthart J., Banfill P.* // Cem. Conc. Res. 2001. 31. P. 1093.
[https://doi.org/10.1016/S0008-8846\(01\)00532-4](https://doi.org/10.1016/S0008-8846(01)00532-4)
3. *Xu P., Zhou J., Li G. et al.* // Constr. Build. Mater. 2021. 228. 123101.
<https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2021.123101>
4. *Kalinichev A.G., Kirkpatrick R.J.* // Chem. Mater. 2002. 14. P. 3539.
<https://doi.org/10.1021/cm0107070>
5. *Cygan R.T., Liang J.-J., Kalinichev A.G.* // J. Phys. Chem. B. 2004. 108. P. 1255.
<https://doi.org/10.1021/jp0363287>
6. *Cygan R.T., Greathouse J.A., Kalinichev A.G.* // J. Phys. Chem. B. 2021. 125. P. 17573.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c04600>
7. *Vchirawongkwin S., Kritayakornupong C., Tongraarc A., Vchirawongkwin V.* // Dalton Transactions. 2014. P. 12164.
<https://doi.org/10.1039/C4DT00273C>
8. *Yadav S., Chandra A.* // J. Phys. Chem. B. 2020. 124 (33). P. 7194.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c02221>
9. *Berendsen H., Grigera J., Straatsma T.* // J. Phys. Chem. 1987. 91 (24). P. 6269.
<https://doi.org/10.1021/j100308a038>
10. *Irish D.E., Thorpe R.V.* // Can. J. Chem. 1975. 53. P. 1414.
<https://doi.org/10.1139/v75-196>
11. *Plimpton S.* // J. Comput. Phys. 1995. 117 (1). P. 1.
<https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
12. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. 2nd Edition. Oxford University Press: New York, 2017. P. 626.
<https://doi.org/10.1093/oso/9780198803195.001.0001>
13. *Galib M., Baer M.D., Skinner L.B. et al.* // J. Chem. Phys. 2017.146(8):084504.
<https://doi.org/10.1063/1.4975608>
14. *Антипова М.Л., Петренко В.Е.* // Журн. физ. химии. 2013. Т. 87. № 7. С. 1196.
<https://doi.org/10.7868/S0044453713070030>
15. *Chowdhuri S., Chandra A.* // Phys. Rev. E. 2002. 66 (4). 041203.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.66.041203>
16. *Кондратюк Н.Д., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* // Высокомолекуляр. соединения. Серия А. 2016. Т. 58. № 5. С. 519.
<https://doi.org/10.7868/S2308112016050072>
17. *Krynicky K., Green C.D., Sawyer D.W.* // Faraday Discuss. Chem. Soc. 1978. 66. P. 199.
<https://doi.org/10.1039/DC9786600199>
18. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 84th ed. / Lide D.R. Ed. CRC Press. 2004.
<https://doi.org/10.1021/ja0336372>
19. *Kostenetskiy P.S., Chulkevich R.A., Kozyrev V.I.* // J. Phys.: Confer. Ser. 2021. Т. 1740. № 1.
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1740/1/012050>