
**ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
ИССЛЕДОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ**

УДК 577:541.124

**ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ АССОЦИИРОВАННЫХ
РАСТВОРОВ С РАЗЛИЧНЫМ ЧИСЛОМ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ СВЯЗЕЙ.
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

© 2019 г. Д. Н. Тарасов^{1*}, Р. П. Тигер¹

¹Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: dmitry.tarasov@mail.ru

Поступила в редакцию 10.09.2018;

после доработки 10.09.2018;

принята в печать 22.10.2018

На основе моделей, применяемых для описания термоассоциированных растворов полимеров, развита клеточная модель ассоциированных растворов низкомолекулярных соединений в случае, когда молекулы растворенного вещества способны образовывать от двух до шести связей друг с другом. Показано, что ассоциированные за счет слабых межмолекулярных взаимодействий растворы в определенном интервале концентраций можно рассматривать как системы, состоящие из “мерцающих” псевдополимерных макромолекул, имеющих фрактальную структуру.

Ключевые слова: растворы, ассоциированные растворы, структура растворов, полимеры, фрактальная размерность, фрактальные структуры, решеточные модели, численные модели.

DOI: 10.1134/S0207401X19050133

ВВЕДЕНИЕ

Строение молекулярных растворов зависит от того, насколько близки или различны энергии взаимодействия молекул растворителя и растворенного вещества друг с другом и между собой. При слабом или почти одинаковом взаимодействии растворы обычно однородны. В этом случае их структура хорошо описывается моделью идеального раствора. При сильном взаимодействии между молекулами растворителя или растворенного вещества происходит расслоение. Когда энергия взаимодействия между молекулами растворенного вещества и растворителя порядка kT , например, в том случае, когда между молекулами образуется водородная связь, раствор перестает быть однородным, в нем возникают связанные группы молекул — молекулярные ассоциаты, комплексы или кластеры [1–3]. В образовании ассоциатов могут принимать участие до десятка тысяч молекул, в некоторых случаях они имеют фрактальную структуру, которая, в частности, обнаружена в растворах алифатических спиртов методом нейтронного рассеяния [4, 5]. Ассоциация за счет водородных связей и обусловленная ею молекулярная организация среды определяют многие физические свойства растворов [6–11], и если в таких растворах протекают химические реакции с участием ассоциатов, это отражается на их кинетических закономерностях [12–18].

В нашей предыдущей работе [19] с помощью численных моделей показано, что в случае, когда молекулы растворенного вещества способны образовывать две достаточно сильные связи друг с другом, в растворе могут возникать фрактальные ассоциаты, аналогичные полимерным клубкам или глобулам. Если молекулы растворенного вещества могут образовать более двух связей, структура раствора, конечно, должна меняться.

Для описания структуры ассоциированных растворов и предсказания их свойств широкое распространение и признание получили численные методы — молекулярной динамики (МД), Монте-Карло (МК), квантовохимические (КХ) расчеты, клеточные модели и другие [20, 21]. Методы, в которых детально описываются взаимодействия между молекулами (КХ, МД и МК), наиболее реально моделируют ассоциированные растворы. Для описания взаимодействия большого количества атомов (более 10 тысяч) на интервалах времени более 10^{-6} с такие методы требуют больших вычислительных мощностей. Среди методов, в которых структура растворов моделируется без детального учета взаимодействия между молекулами, наибольшей вычислительной производительностью обладают клеточные модели, которые позволяют рассматривать системы из большого числа частиц (более 10^9) на больших временных интервалах (более 10^{-6} с) [22, 23].

Клеточные модели особенно заметно продемонстрировали свою эффективность при описании растворов полимеров [22, 23]. Последние отличаются от растворов низкомолекулярных соединений, способных к межмолекулярной ассоциации, тем, что в растворах полимеров между звеньями макромолекулы существуют ковалентные связи, которые с течением времени не могут разрушаться, а в растворах ассоциированных молекул связи между ними могут разрываться и создаваться заново. Среди растворов полимеров существует особый класс так называемых термоассоциированных растворов. В таких растворах макромолекулы за счет слабого межмолекулярного взаимодействия концевых групп способны образовывать нековалентные связи друг с другом, точно такие же, как образуют молекулы в ассоциированных растворах. Для термоассоциированных растворов на основе клеточных моделей разработаны и успешно применяются эффективные способы описания их структуры [24–26]. В данной работе на основе моделей, применяемых для описания термоассоциированных растворов полимеров, развита клеточная модель ассоциированных растворов низкомолекулярных соединений в случае, когда молекулы растворенного вещества способны образовывать от двух до шести связей друг с другом.

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ

Моделирование осуществляли в трехмерном пространстве. В качестве основы использовали модель цепи с флуктуирующей длиной связей (Bond Fluctuation Model, BFM), развитую в работе [22], — наиболее удачную и чаще всего применяемую для описания особенностей поведения макромолекул.

Модель BFM — решеточная модель макромолекул в растворе, в которой мономер занимает несколько узлов на решетке. В BFM существует определенный набор разрешенных расстояний между связанными ковалентной связью мономерами. Мономеры не могут пересекаться друг с другом. Перемещение мономеров в BFM осуществляется по алгоритму Монте-Карло: случайным образом выбираются мономер и соседний с ним узел, и если в новом узле расстояния между соседними мономерами являются разрешенными, а узел не занят, то перемещение осуществляется с вероятностью $P \sim \exp(-\Delta E/kT)$, где ΔE — разность энергий системы до и после перемещения.

Так же, как и в BFM, в нашей модели частицы размещались на трехмерных решетках с периодическими граничными условиями. Размеры решеток составляли от $26 \times 26 \times 26$ до $170 \times 170 \times 170$ узлов. Как и в работе [22], мономерные звенья имели размер $2 \times 2 \times 2$ и величина разрешенных расстояний изменялась от 2 до $10^{1/2}$. В отличие от BFM,

в нашей модели, как и в моделях обратимо ассоциированных полимерных растворов, связи между частицами — мономерными звеньями могли разрушаться и образовываться снова. Разрушение связи осуществлялось с вероятностью $P \sim \exp(-\Delta E_H/kT)$, где ΔE_H — энергия образования связи между мономерами. Новая связь образовывалась всякий раз, когда два мономерных звена оказывались на расстоянии менее чем $10^{1/2}$ друг от друга, и при этом число новых связей у звеньев не превышало значение от двух до шести в зависимости от начальных условий моделирования.

В настоящей работе развита модель раствора, в котором за счет слабых взаимодействий имеет место ассоциация изначально не связанных между собой частиц. В отличие от модели обратимо ассоциированных полимерных растворов в нашей модели не было связей, которые не могли бы при определенных условиях разрушаться. Формально такую модель можно рассматривать как модель обратимо ассоциированных полимерных растворов, в которой макромолекула полимера состоит только из одного мономера.

Общее число мономеров A в ходе экспериментов было равно 1024. Концентрация A в системе рассчитывалась, как отношение числа мономеров к числу узлов решетки, умноженное на 8, и изменялась от 0.0017 до 0.47.

В начальный момент времени на решетке случайным образом, но без пересечений, разрешенных в BFM, размещались мономеры A . Подсчет всех величин начинался после того как время эксперимента было в 3 раза больше времени перемещения мономера A на расстояние, сопоставимое с размером решетки. Это время было всегда больше, чем 10^6 шагов моделирования, где за один шаг осуществлялась попытка перемещения каждого мономера в системе. Все значения усреднялись в течение времени, равного времени до начала усреднения. Для каждой системы результаты усреднялись по 10–100 реализациям.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 представлена зависимость доли p частиц, входящих в ассоциаты, от их концентрации A при энергии образования связи между ними $E_H = 0$ (1), $E_H = -1kT$ (2), $E_H = -3kT$ (3) для различных значений N , где N — максимальное число возможных связей, которое может образовывать одна частица. Когда энергия связи недостаточно высокая ($E_H = -1kT$), при низких концентрациях существенный вклад в ассоциацию вносит только парное взаимодействие между частицами. В этом случае ассоциация не зависит от максимального числа возможных связей, которое может образовывать одна частица, ведь между частицами может образоваться только одна связь (рис. 1, кривая 2).

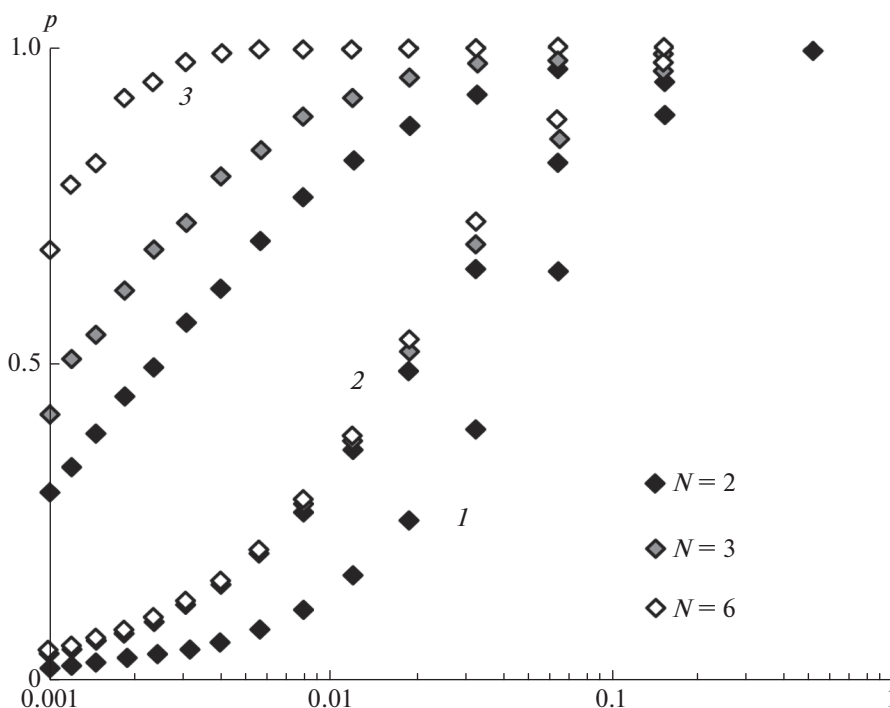


Рис. 1. Зависимость доли p частиц, входящих в ассоциаты, от их концентрации A и энергии связи между ними $E_H = 0$ (1), $E_H = -1kT$ (2), $E_H = -3kT$ (3).

Когда энергия связи более высокая ($E_H = -3kT$), то при низких концентрациях ассоциация определяется не только парными взаимодействиями. Концентрация пар — димеров становится существенной, и они начинают взаимодействовать с другими частицами, что ведет к образованию тримеров, тетрамеров и более крупных ассоциатов. Когда во взаимодействие вовлекается три и более частиц, максимальное число возможных связей, которое может образовывать одна частица, имеет значение, и чем оно больше, тем больше степень ассоциации (рис. 1, кривая 3).

На рис. 2 показаны молекулярно-массовые распределения ассоциатов по размеру W при концентрации частиц $[A] = 0.033$ при энергии образования связи между частицами $E_H = -1.5kT$ (а) и $E_H = -3kT$ (б), где W — вероятность нахождения частицы в ассоциате кратности n . Данные приведены для различных значений N , где N — максимальное число возможных связей, которое может образовывать одна частица.

При $N = 2$ как в случае (а), когда энергия образования связи между частицами $E_H = -1.5kT$, так и в другом случае (б), когда $E_H = -3kT$, в системе образуются ассоциаты различной кратности, причем при увеличении энергии связи количество ассоциатов более высокой кратности увеличивается. Достаточно большие ассоциаты в этом случае ведут себя почти как макромолекулы полимера в растворе, т.е. образуют достаточно рыхлые

клубки, так как между частицами нет никакого иного взаимодействия, кроме возможности образовать связь. Как уже отмечалось, ассоциаты в нашей модели несколько отличаются от настоящих полимерных макромолекул, так как связь внутри ассоциата может разрываться и образовываться заново, а в полимерной макромолекуле такая связь не разрывается.

При $N = 6$ как в случае (а) ($E_H = -1.5kT$), так и в другом случае (б) ($E_H = -3kT$) в системе наблюдается образование одного крупного ассоциата, причем этот ассоциат имеет плотную структуру — фактически структуру жидкости. Иными словами, в системе наблюдается расслоение, и частицы образуют капельку — новую фазу. Однако не все они входят в эту капельку: в свободном пространстве остается некоторое количество частиц, которые при движении и подходе к капельке становятся ее частью, но в тоже время иногда некоторые частицы отрываются от нее. По этой причине существует небольшое количество ассоциатов, не входящих в капельку, и на рис. 2 (а, б) видны эти точки.

При $N = 4$ в случае (б) ($E_H = -3kT$), как и при $N = 6$, в системе наблюдается образование одного крупного ассоциата, причем этот ассоциат имеет плотную структуру — структуру жидкости, т.е. происходит расслоение и частицы образуют новую фазу. Но при $N = 4$ в случае (а) ($E_H = -1.5kT$) в системе не происходит расслоения и образования капелек, хотя и большее количество частиц

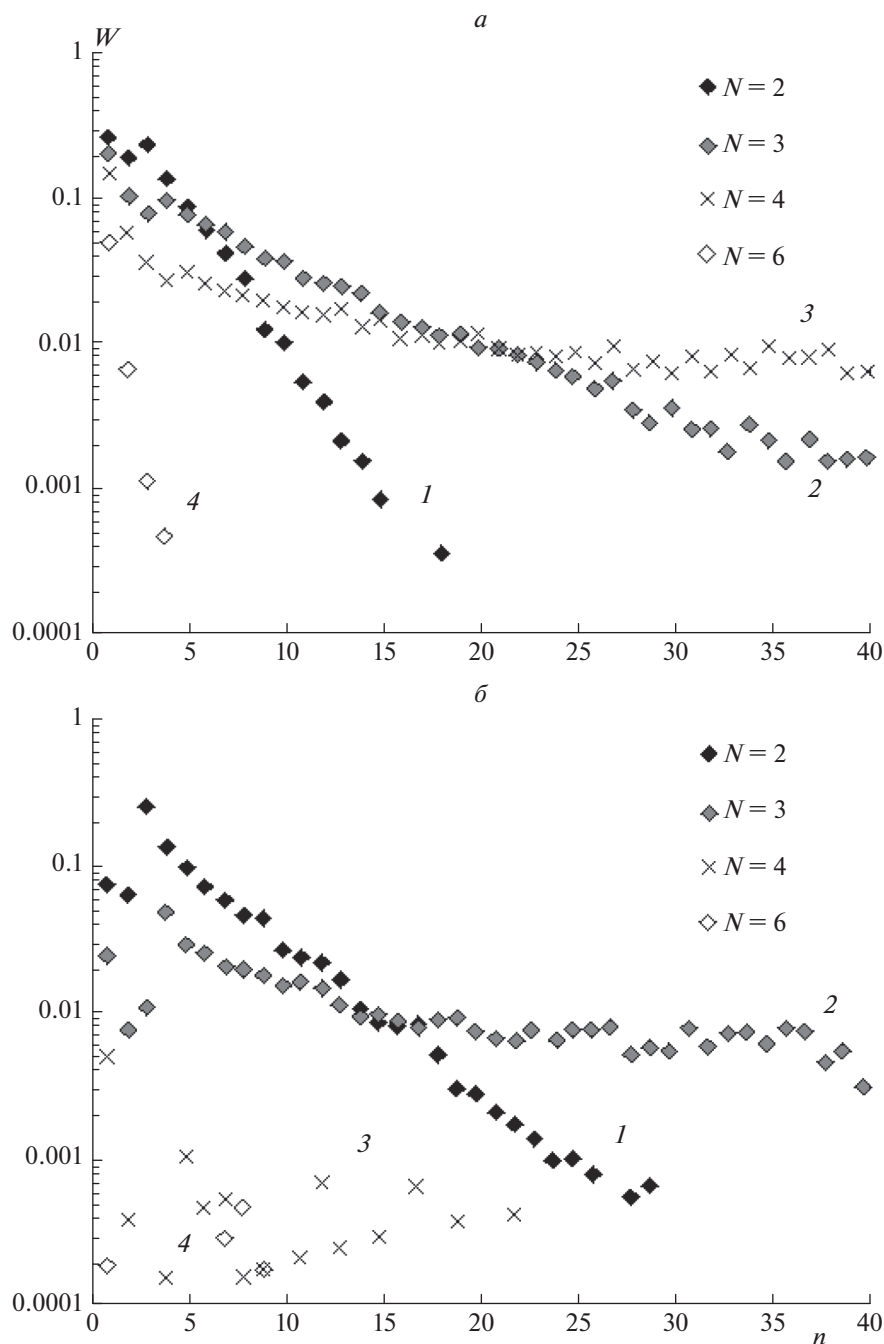


Рис. 2. Молекулярно-массовые распределения ассоциатов, W , по их размеру n при концентрации частиц $[A] = 0.033$ и энергии связи между частицами $E_H = -1.5kT$ (а) и $E_H = -3kT$ (б); W – вероятность нахождения частицы в ассоциате кратности n .

находится внутри крупных ассоциатов, но эти ассоциаты имеют довольно рыхлую структуру, почти такую, как макромолекулы полимера в растворе, и частицы при $N = 2$.

При $N = 3$ как в случае (а) ($E_H = -1.5kT$), так и в случае (б) ($E_H = -3kT$) в системе не наблюдается расслоения. Большее количество частиц находится внутри крупных ассоциатов, но они имеют до-

вольно рыхлую структуру, почти такую же, как макромолекулы полимера в растворе и частицы при $N = 2$. Причем в случае $N = 3$ и при других концентрациях частиц, и при больших энергиях E_H нам также не удалось наблюдать расслоения и образования капельки. В этом случае система велла себя почти как макромолекулы полимера в растворе: образовывались достаточно рыхлые

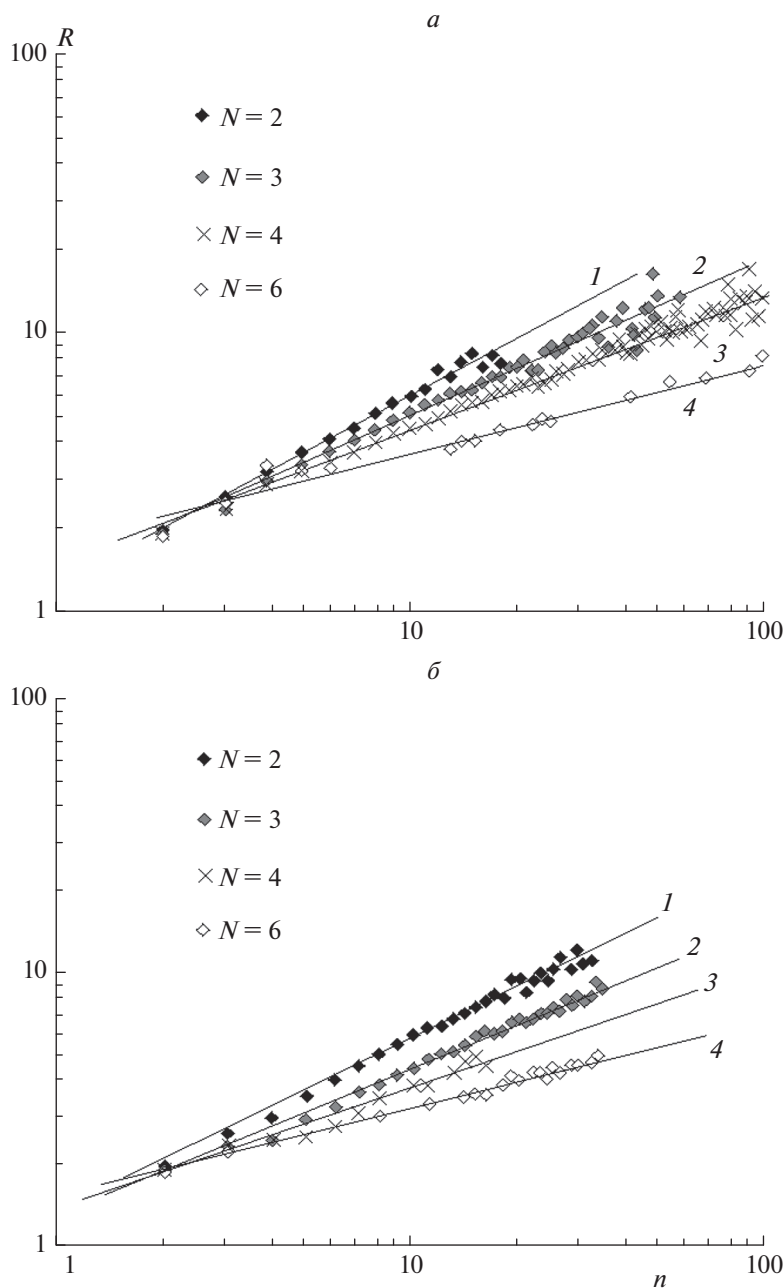


Рис. 3. Зависимость радиуса инерции ассоциата R от его размера n при концентрации частиц $[A] = 0.033$ и энергии связи между частицами $E_H = -1.5kT$ (а) и $E_H = -3kT$ (б).

клубки, хотя, в принципе, за счет третьей связи частицы могли бы образовывать капельку.

На рис. 3 представлена зависимость радиуса инерции ассоциата R от его размера n при концентрации частиц $[A] = 0.033$, энергии образования связи между частицами $E_H = -1.5kT$ (а) и $E_H = -3kT$ (б). Радиус инерции R вычислялся по формуле

$$R^2 = \frac{1}{2n^2} \sum_{i,j} (r_i - r_j)^2,$$

где n — число мономерных звеньев в макромолекуле, r_i — расстояние до i -го мономера.

Из рис. 3 видно, что во всех случаях ассоциаты имеют фрактальную структуру, т.е. зависимость радиуса инерции ассоциата от его размера с хорошей точностью описывается степенной формулой. При энергии образования связи между частицами $E_H = -1.5kT$ (рис. 3а), то при $N = 2$ зависимость имеет показатель степени 0.69. Для полимерной макромолекулы размеры макромолекул в растворе (радиус инерции R), когда между мономерными

звеньями есть только ковалентное взаимодействие и объемное отталкивание, зависят от числа мономерных звеньев по степенному закону $R \sim n^{0.6}$. В этом случае образованные за счет временной связи ассоциаты близки по своей структуре к структуре полимерной макромолекулы, хотя и являются чуть более рыхлыми. К тому же, размер ассоциатов здесь ограничен и, как видно из рис. 3а, не превышает 20 частиц.

При $N = 3$ ($E_H = -1.5kT$) степенная зависимость имеет показатель степени 0.56, что несколько меньше 0.6, как в случае полимерной макромолекулы и как при $N = 2$. В этом случае ассоциаты являются более плотными, и, как видно из рис. 3а, их размер достигает 60 частиц, что значительно больше, чем при $N = 2$.

При $N = 4$ ($E_H = -1.5kT$) зависимость имеет показатель степени 0.49, что значительно меньше, чем 0.6, как в случае полимерной макромолекулы, и 0.56, как при $N = 3$. В этом случае ассоциаты являются еще более плотными, и, как видно из рис. 3а, их размер достигает 100 частиц и более. Тем не менее эти ассоциаты не являются каплями с четко выраженными границами.

При $N = 6$ ($E_H = -1.5kT$) степенная зависимость имеет показатель 0.33, вследствие того, что частицы образуют капельки. Для капельки $n \sim V \sim R^3$, т.е. $R \sim n^{1/3}$, что и наблюдается в том случае, когда показатель степени равен 0.33. На рис. 3а в этом случае не для каждого размера отображены радиусы инерции, поскольку большинство частиц практически весь эксперимент находятся внутри одной большой капли размером 2024, а точки, которые видны на графике, получились, когда от большой капли временно отделялись небольшие ассоциаты, которые тоже, как видно из рисунка, имели структуру маленьких капелек.

При энергии связи между частицами $E_H = -3kT$ (рис. 3б) при $N = 2$ степенная зависимость имеет показатель степени 0.63, что в большей степени соответствует случаю полимерной макромолекулы (0.6), и по сравнению с $E_H = -1.5kT$ за счет увеличения силы связи возрос максимальный размер ассоциатов до 30. При $N = 3$ ($E_H = -3kT$) зависимость имеет показатель степени 0.53, что практически соответствует случаю $E_H = -1.5kT$, при этом максимальный размер ассоциатов даже несколько уменьшился.

При $N = 4$, $N = 6$ и $E_H = -3kT$ (в отличие от случая, когда $N = 4$ и $E_H = -1.5kT$) в системе появилось расслоение, т.е. возникла одна большая плотная капля, в которую входят практически все частицы. Точки, которые видны на кривых 3 и 4 (рис. 3б) получились в случае, когда от большой капли временно отделялись небольшие ассоциаты; но, если в случае $N = 6$ эти ассоциаты были сами каплями (показатель степени 0.33), то в

случае $N = 4$ структура этих маленьких ассоциатов была более рыхлой (показатель степени 0.45).

Во всех экспериментах при других энергиях связи и других концентрациях в случаях $N = 2$ и $N = 3$ расслоение с образованием капелек нами не наблюдалось, и ассоциаты всегда имели фрактальную структуру, близкую к структуре полимерной макромолекулы, хотя иногда несколько более плотную или рыхлую. В случаях $N = 4$ и $N = 6$ при энергиях связи $E_H < -1.5kT$ и $E_H < -1.0kT$ и определенных концентрациях наблюдалось расслоение: появилась одна большая плотная капля, включающая практически все частицы. При энергиях связи $E_H \geq -1.5kT$ и $E_H \geq -1.0kT$ и любых концентрациях расслоение не наблюдалось. Появлялись ассоциаты, причем их структура в зависимости от энергии и концентрации могла меняться от структуры капелек (показатель степени 0.33) до структуры полимерной макромолекулы (показатель степени 0.6).

Клубок полимерной макромолекулы в растворе имеет фрактальную структуру [27–29]. При этом зависимость среднего числа мономерных звеньев внутри области размером R от ее размера имеет степенной вид с показателем степени, равным фрактальной размерности D данной структуры. Фрактальной структурой обладают и так называемые полуразбавленные растворы полимеров. Максимальное расстояние, на котором сохраняется фрактальная структура, это и есть радиус корреляции. Для полимерных макромолекул в модели BFM [22] и, согласно теоретическим представлениям [27, 28], фрактальная размерность $D = 1.67$, а радиус корреляции равен размеру клубка макромолекулы в случае разбавленных растворов и уменьшается с увеличением концентрации мономерных звеньев в случае полуразбавленных растворов. На рис. 4 в качестве примера представлена зависимость среднего числа мономерных звеньев внутри области размером R от размера области при $\Delta E_H = -4kT$ и концентрации мономерных звеньев $[A] = 0.084$ в том случае, когда максимальное число возможных связей равно двум. Видно (кривая 2), что эта зависимость до значений $R = 12$ имеет степенной вид с показателем степени 2.5, т.е. до этих размеров структура раствора является фрактальной с $D = 2.5$. В случае, когда максимальное число возможных связей равно трем, четырем и шести, при определенных концентрациях мономерных звеньев и определенной энергии связи между мономерами ΔE_H также наблюдались аналогичные закономерности: возникали области с фрактальной структурой определенного размера, были видны зависимости среднего числа мономерных звеньев внутри области размером R от этого размера.

На рис. 5 представлена зависимость радиуса корреляции (среднего размера фрактальных кла-

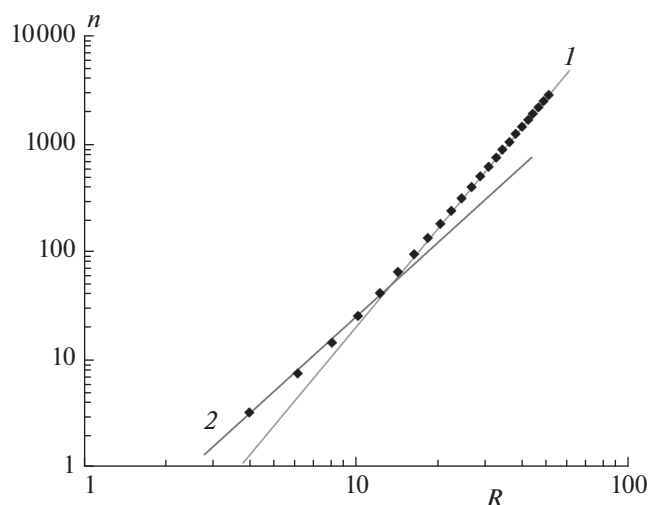


Рис. 4. Зависимость среднего числа мономерных звеньев n внутри области размером R от этого размера при $\Delta E_H = -4kT$ и концентрации мономерных звеньев $[A] = 0.084$ в случае, когда максимальное число возможных связей равно двум. Кривая 1 – $R \sim n^3$, кривая 2 – $R \sim n^{2.5}$.

стеров) R и фрактальной размерности D от концентрации мономерных звеньев A при $E_H = -3.0kT$ в том случае, когда максимальное число возможных связей равно двум и трем и при $E_H = -1.5kT$, когда максимальное число возможных связей равно четырем. Видно, что начиная с концентрации $[A] \approx 0.006$, в системе образуются фрактальные кластеры. При увеличении степени ассоциации и размера ассоциатов с ростом концентрации мономерных звеньев размер фрактальных неоднородностей увеличивается. Начиная с концентрации $[A] \approx 0.01$ – 0.06 , фрактальные неоднородности занимают весь объем системы и начинают проникать друг в друга, что ведет к уменьшению радиуса корреляции. В случае, когда максимальное число возможных связей равно трем или четырем, размер фрактальных областей до момента проникновения этих областей друг в друга несколько больше, чем в случае, когда число возможных связей равно двум, и проникновение областей в первом случае начинается при меньшей концентрации, чем во втором. В отличие от раствора полимерных макромолекул, в которых $D = 1.67$ фрактальная размерность ассоциированных растворов меняется от 2.0 до 2.8 с ростом концентрации. Причем, чем больше число возможных связей может образовывать мономерное звено, тем больше будет фрактальная размерность при одной и той же концентрации, что не удивительно, ведь более разветвленные структуры обладают большей фрактальной размерностью.

На рис. 6 представлена область существования фрактальных структур в ассоциированном рас-

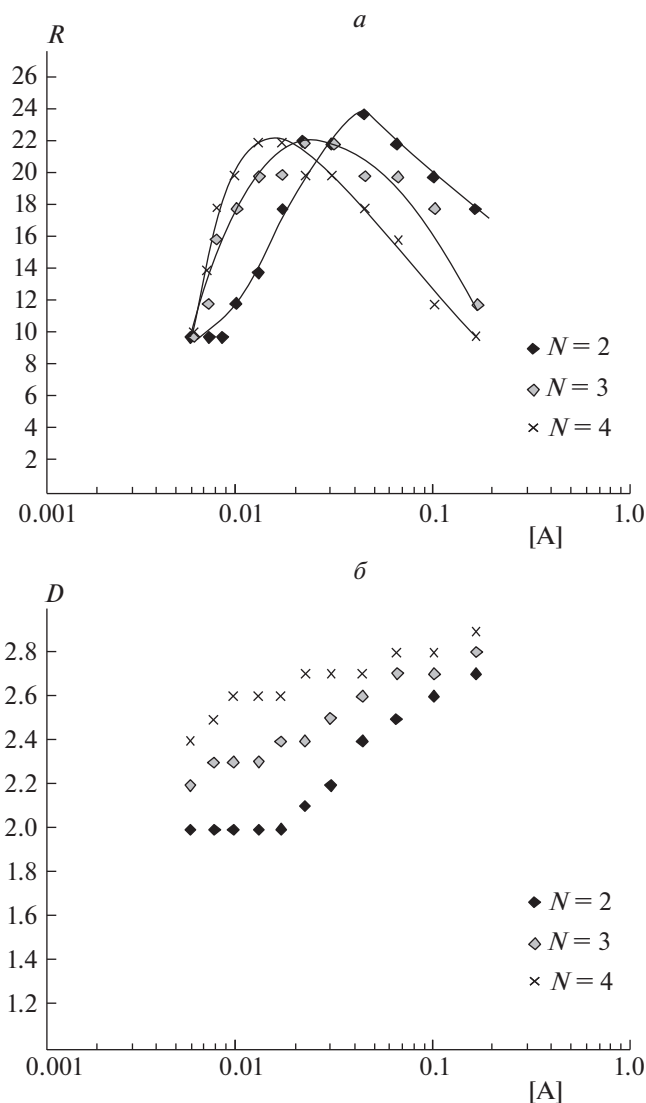


Рис. 5. Зависимость среднего размера фрактальных кластеров R и их фрактальной размерности D от концентрации мономерных звеньев $[A]$ при $E_H = -3.0kT$ в случае, когда максимальное число возможных связей равно двум и трем и при $E_H = -1.5kT$ в случае, когда максимальное число возможных связей равно четырем.

творе мономерных звеньев в зависимости от их концентрации, энергии связи между звеньями и числом максимально возможных связей. Видно, что в случае, когда число максимально возможных связей равно двум или трем в интервале концентраций мономерных звеньев от $[A] \approx 0.006$ до $[A] \approx 0.3$, начиная с энергии связи $E_H \leq -1kT$, в системе существуют фрактальные, полимероподобные структуры, обусловленные образованием ассоциатов – “мерцающих” макромолекул и структурированием этих ассоциатов.

В случае, когда число максимально возможных связей равно четырем или шести, то в интервале

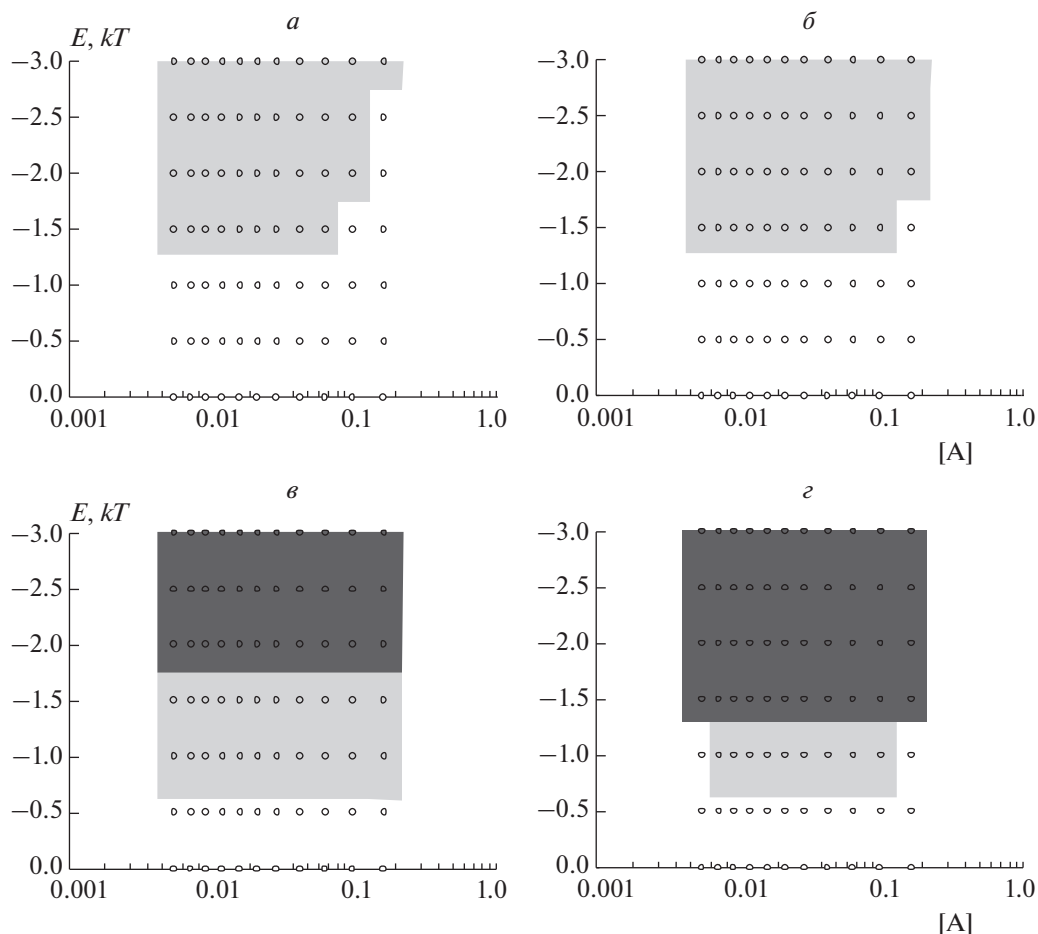


Рис. 6. Область существования фрактальной структуры в растворе в зависимости от концентрации мономерных звеньев $[A]$ и энергии связи между ними, E_H , в случае, когда максимальное число возможных связей равно двум – рис. 6а, трем – рис. 6б, четырем – рис. 6в, шести – рис. 6г. Темно-серым цветом выделены области, в которых происходит расслоение растворов; светло-серым цветом выделены области, в которых происходит образование фрактальных структур; белым цветом выделены области, в которых раствор практически идеальный.

концентраций мономерных звеньев от $[A] \approx 0.006$ до $[A] \approx 0.3$ имеются некоторые области значений энергий связи ($-1kT \leq E_H \leq -0.5kT$), при которых существуют фрактальные, полимероподобные структуры, обусловленные образованием ассоциатов – “мерцающих” макромолекул. Но при увеличении энергий связи $E_H \leq -1kT$ система становится гетерогенной: распадается на крупные области, состоящие исключительно из мономерных звеньев, что не наблюдается ни при каких энергиях, когда число максимально возможных связей равно двум или трем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результатом численного моделирования установлено, что ассоциированные за счет слабых межмолекулярных взаимодействий растворы в случае, когда молекулы растворенного вещества способны образовывать две или три связи друг с другом, в

определенном интервале концентраций можно рассматривать как системы, состоящие из “мерцающих” псевдополимерных макромолекул, имеющих фрактальную структуру. Энергия образования связи между мономерными звеньями $E_H = -1.5kT$ примерно соответствует энергиям водородной связи молекул воды, аминов и спиртов. При этом не удалось обнаружить условий, при которых наблюдалось бы расслоение растворов.

В случае, когда молекулы растворенного вещества способны образовывать четыре и более связей друг с другом в определенном интервале концентраций мономерных звеньев и энергий связи, в системе существуют фрактальные, полимероподобные структуры. Но при увеличении энергий связи $E_H \leq -1kT$ система расслаивается, становясь гетерогенной: распадается на крупные области, состоящие исключительно из мономерных звеньев, что не наблюдается ни при каких условиях,

когда число максимально возможных связей равно двум или трем.

Работа выполнена в рамках госзадания (тема V45.5, 0082-2014-0015, № АААА-А17-117032750201-9) и при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 17-03-00146.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Tarasov D.N., Tiger R.P.* // J. Comput. Chem. 2008. V. 29. № 2. P. 220.
2. *Тарасов Д.Н., Тугер Р.П.* // Хим. физика. 2005. Т. 24. № 1. С. 42.
3. *Тарасов Д.Н., Тугер Р.П.* // Хим. физика. 2006. Т. 25. № 5. С. 23.
4. *Misawa M., Dairoku I., Honma A., Sato T., Maruyama K. et al.* // J. Chem. Phys. 2004. V. 121. № 10. P. 4716.
5. *Misawa M., Sato T., Onozuka A.* // J. Appl. Crystallogr. 2007. V. 40. № 1. P. 93.
6. *Brini E., Fennell C.J., Fernandez-Serra M., Hribar-Lee B., Lukšič M. et al.* // Chem. Rev. 2017. V. 117. № 19. P. 12385.
7. *Li R., D'Agostino C., McGregor J., Mantle M.D., Zeitler J.A., Gladden L.F.* // J. Phys. Chem. B. 2014. V. 118. P. 10156.
8. *Mishima O., Stanley H.E.* // Nature. 1998. V. 396. P. 329.
9. *Matisz G., Kelterer A.-M., Fabian W.M.F., Kunsági-Máte S.* // Phys. Chem. Chem. Phys. 2015. V. 17. P. 8467.
10. *Požar M., Lovrinčević B., Zoranić L., Primorać T., Sokolić F. et al.* // Ibid. 2016. V. 18. P. 23971.
11. *Wrzeszcz W., Mazurek S., Szostak R., Tomza P., Czarnecki M.A.* // Spectrochim. Acta A. 2018. V. 188. P. 349.
12. *Tomza P., Wrzeszcz W., Mazurek S., Szostak R., Czarnecki M.A.* // Spectrochim. Acta A. Mol. Biomol. Spectrosc. 2018. V. 197. P. 88.
13. *Тарасов Д.Н., Тугер Р.П., Энтелис С.Г., Горшков А.В., Запорожская С.В.* // Кинетика и катализ. 1997. Т. 38. № 4. С. 516.
14. *Тарасов Д.Н., Тугер Р.П., Энтелис С.Г., Горшков А.В., Левина М.А.* // Ibid. 1998. Т. 39. № 1. С. 32.
15. *Тугер Р.П., Левина М.А., Энтелис С.Г., Андреев М.В.* // Ibid. 2002. Т. 43. № 5. С. 709.
16. *Draye A.C., Tondeur J.-J., Tarasov D.N.* // React. Kinet. Catal. Lett. 1999. V. 66. № 2. P. 199.
17. *Неверов А.А., Дейко С.А., Яцимирский А.К.* // Кинетика и катализ. 1989. Т. 30. № 4. С. 793.
18. *Huskey W.P., Warren C.T., Hogg J.L.* // J. Org. Chem. 1981. V. 46. № 1. P. 59.
19. *Тарасов Д.Н., Тугер Р.П.* // Хим. физика. 2013. Т. 32. № 10. С. 66–71.
20. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer simulation of liquids. 2nd ed. Oxford University Press: N.Y., 2017.
21. *Binder K.* Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulations in Polymer Science. Oxford University Press: N.Y., 1995.
22. *Carmesin I., Kremer K.* // Macromolecules. 1988. V. 21. № 9. P. 2819.
23. *Shaffer S.* // J. Chem. Phys. 1994. V. 101. № 5. P. 4205.
24. *Chen C.C., Dormidontova E.E.* // Macromolecules. 2004. V. 37. № 10. P. 3905.
25. *Karl F.F.* // J. Chem. Phys. 2012. V. 136. № 24. P. 244904.
26. *Li Z., Djohari H., Dormidontova E.E.* // Ibid. 2010. V. 133. № 18. P. 184904.
27. *Де Жен П.* Идеи скейлинга в физике полимеров. М.: Мир, 1982.
28. *Лифшиц И.М., Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р.* // УФН. 1979. Т. 127 № 3. С. 353.
29. *Смирнов Б.М.* // Ibid. 1986. Т. 149. № 2. С. 177.