

ТЕОРИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 541.64:536.7:539.199

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ ДИБЛОК-СОПОЛИМЕРА СТЕРЖЕНЬ–КЛУБОК МЕТОДОМ ДИССИПАТИВНОЙ ДИНАМИКИ ЧАСТИЦ

© 2019 г. А. В. Березкин^{a,b,*}, Я. В. Кудрявцев^{a,c}, М. А. Осипов^{a,d}

^aИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук
119991 Москва, Ленинский пр., 29, Россия

^bTechnische Universität München
85747 Garching, James-Franck-Str., 1, Germany

^cИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук
119071 Москва, Ленинский пр., 31, Россия

^dUniversity of Strathclyde, Mathematics and Statistics
G1 1XH, Glasgow, Richmond str., 26, Scotland, UK

* e-mail: berezkin.anatoly1@gmail.com

Поступила в редакцию 09.03.2019 г.

После доработки 13.03.2019 г.

Принята к публикации 18.03.2019 г.

Методом диссипативной динамики частиц построена уточненная фазовая диаграмма диблок-сополимера стержень–клубок в координатах состав сополимера–параметр отталкивания звеньев разного типа. Диаграмма описывает микрофазное расслоение блоков сополимера и ориентационное упорядочение жестких блоков. Моделирование стержнеобразных блоков как жестких тел позволило снизить вычислительные затраты, увеличить размер ячейки моделирования до $32 \times 32 \times 32$ и общую длину цепи сополимера N до 20, а также варьировать состав цепи сополимера с меньшим шагом (до 0.05) и исследовать поведение систем при больших степенях сегрегации блоков (до $\chi N \approx 250$). Такая оптимизация дала возможность впервые наблюдать упорядочение жестких блоков не только в ламellarной, но и в биконтинуальной морфологии. Показано также, что описываемые не только в численных, но и в лабораторных экспериментах зигзагообразные и двуслойные ламели метастабильны и исчезают при увеличении размеров моделируемой системы.

DOI: 10.1134/S2308112019040023

ВВЕДЕНИЕ

Проводящие полимеры как правило обладают повышенной жесткостью из-за присутствия сопряженных связей. Один из способов улучшения их растворимости, и, как следствие, перерабатываемости, заключается в использовании блок-сополимеров стержень–клубок. Благодаря конформационной асимметрии такие сополимеры образуют разнообразные микродоменные структуры, применяемые в фотовольтаике и смежных областях [1, 2]. В гибких сополимерах микрофазное разделение контролируется соотношением длины химически различающихся блоков и степенью их сегрегации. Замена одного из гибких блоков жестким снижает конформационную энтропию сополимера, облегчая возникновение устойчивых микроструктур. Соотношение между длиной и диаметром стержнеобразного блока становится дополнительным фактором, определяющим вид фазовой диаграммы. Появление в сополимере мезогенного фрагмента делает возможным пере-

ход от изотропного к нематическому или смектическому упорядочению стержней в доменах.

К настоящему моменту для диблок-сополимеров стержень–клубок в экспериментах, наряду с обычными морфологиями (мицеллы, цилиндры, биконтинуальные структуры, ламели) наблюдали смектические слои [3–7], стреловидные, z-образные, волнистые и перфорированные ламели [8–24]. Для сополимеров с полужесткими стержнями в рамках самосогласованной теории среднего поля (SCFT) предсказано существование одно- и двуслойных ламелей по типу смектиков А и С, а также разнообразные переходы между ними [22].

Первоначальные теоретические усилия по построению фазовой диаграммы сополимеров стержень–клубок были направлены на сравнение значений свободной энергии для различных морфологий [25, 26]. В предположении о том, что стержни образуют смектик А, было предсказано образование мицелл в форме хоккейной шайбы или гексагонально упакованных цилиндров с ла-

мелярной сердцевинной прямоугольного сечения, состоящей из стержней. Дальнейшие исследования методами мезоскопического молекулярного моделирования [16–18, 23, 24] показали, что энтропийно смектик С часто более выгоден, чем смектик А, поскольку наклон стержней в смектических ламелях статистически более вероятен. Кроме того, в этом случае снижается плотность точек сочленения гибких и жестких блоков на поверхности ламелей и повышается конформационная энтропия гибких блоков.

Впоследствии построение фазовой диаграммы сополимеров стержень–клубок велось главным образом методами SCFT [19–22, 27–31] и молекулярной динамики [16–18, 23, 24, 32]. В работе [18] броуновской молекулярной динамикой с потенциалами Леннард-Джонса систематически исследованы фазовые диаграммы в координатах состав–сегрегация блоков для трех фиксированных значений длины жесткого блока. При этом наблюдались разнообразные нетривиальные морфологии: ламелярная кристаллическая, стреловидная и чередующаяся стреловидная, гексатик В, смектики А и С, ламелярная нематическая, ламелярная, ламелярная гексагонально перфорированная, ламелярная волнистая и цилиндрическая гексагональная.

Первые исследования микрофазного расслоения сополимеров стержень–клубок методом диссипативной динамики частиц (DPD) выполнены в работах AlSunaidi с соавторами [23, 24]. Варьируя температуру и степень сегрегации блоков сополимера R_7C_7 при плотности частиц $\rho_0 = 4$ авторы наблюдали формирование кристаллической и смектической А фаз. Фазовая диаграмма методом DPD была построена в работе [32] при плотности $\rho_0 = 5$, длине сополимера $N = 10$, варьируемом составе сополимера и степени сегрегации его блоков. Были обнаружены кристаллическая ламелярная, ламелярная, гироидная, цилиндрическая и мицеллярная фазы. Следует отметить, что в силу ограниченной длины цепей состав сополимера варьировали с большим шагом ($\Delta f_A = 0.1$). Ориентационное упорядочение цепей наблюдали лишь при доле жесткого блока $f_A \geq 0.7$, когда жесткий фрагмент содержал 7 и более звеньев. В целом DPD приводит к фазовым диаграммам, близким к тем, что получены броуновской молекулярной динамикой.

До настоящего времени метод DPD мало применялся для исследования фазового поведения сополимеров стержень–клубок. Причина состоит в том, что моделирование проводили при высокой плотности частиц, что не позволяло рассматривать ячейки размерами более $20 \times 20 \times 20$ и сополимеры более чем из $N = 10$ звеньев. Относительно короткие жесткие блоки в таких молекулах обладали сравнительно невысокой склон-

ностью к ориентационному упорядочению, и его удавалось наблюдать лишь в ламелярной морфологии.

В настоящей работе методом DPD построена более подробная фазовая диаграмма диблок-сополимера стержень–клубок для цепей длиной $N = 20$ в ячейке размером $32 \times 32 \times 32$ при средней плотности частиц $\rho_0 = 3$. Благодаря большей длине цепи состав сополимера на фазовой диаграмме варьировали с шагом $\Delta f_A = 0.05$, при этом максимальная исследованная степень сегрегации χN_{max} достигла ≈ 250 (в работе [32] $\Delta f_A = 0.1$, $\chi N_{max} = 80$). Согласно полученной нами диаграмме, ориентационное упорядочение может возникать не только в ламелярной, но и в биконтинуальной морфологии.

МОДЕЛЬ И МЕТОД РАСЧЕТА

Крупномасштабное молекулярное моделирование сополимеров, содержащих жесткие фрагменты, затруднено [33]. Такие системы релаксируют гораздо медленнее, чем гибкие молекулярные цепи той же длины с широким спектром времен релаксации, включающим быстрые моды отдельных звеньев. Среди огрубленных мезоскопических методов одним из наиболее перспективных считается диссипативная динамика частиц. Благодаря большому шагу интегрирования уравнений движения и низким коэффициентам трения частиц с “мягкими” потенциалами, с ее помощью удается наблюдать самоорганизацию макромолекул на относительно больших пространственно-временных масштабах. Методом DPD уже изучали смеси монодисперсных [34, 35] и бидисперсных [36], а также двублочных жестких наностержней [37] с диблок-сополимерами, образующими ламелярную [34, 36, 37] и гексагональную [35–37] микродоменные структуры, а также поведение углеродных нанотрубок в концентрированном растворе диблок-сополимера [38]. “Стандартный” подход, разработанный R.D. Groot и P.B. Warren [39] для гибкоцепных полимеров, недостаточен для моделирования жестких блоков. Для этого в литературе предложен ряд модификаций DPD для введения жесткости. Один из способов связан с корректировкой валентных потенциалов и добавлением угловых потенциалов [40–46], однако он требует уменьшения шага интегрирования в 5–10 раз для сохранения устойчивости численного решения уравнений движения частиц, что замедляет вычисления. Мы используем альтернативный подход, уже показавший ранее свою эффективность, а именно моделирование стержнеобразных фрагментов как жестких тел по алгоритму T.F. Miller с сотрудниками [47] в NVE-ансамбле. Он исключает из рассмотрения взаимодействия частиц внутри жесткого блока, оптимизируя расчет сил.

Другая проблема стандартного метода DPD заключается в том, что нематическое упорядочение наностержней, обусловленное их стерическим отталкиванием, затруднено. Причина этого состоит в “мягкости” межчастичных взаимодействий по сравнению с классическими молекулярными потенциалами, такими как потенциал Леннарда-Джонса. Для преодоления указанных трудностей предлагались различные подходы. В работах [40–43] вдвое уменьшали длину связей в жестком блоке, что приводило к повышению плотности и соответствующему усилению стерических взаимодействий. К сожалению, при этом в равной степени возрастает число частиц и, как следствие, вычислительные затраты. В литературе показано, что нематическое упорядочение жестких [23] и полужестких [48] стержней со стандартными потенциалами DPD можно наблюдать лишь при длине жесткого стержня $N_R \geq 7$. В данной работе мы провели моделирование как с обычным для DPD значением параметра отталкивания идентичных частиц $a_{AA} = a_{BB} = 25$, так и при $a_{AA} = a_{BB} = 50$, что облегчает ориентационное упорядочение стержнеобразных частиц. Однако эффект параметра отталкивания оказался относительно слаб, поэтому основные результаты приводятся для стандартного случая.

Более подробное описание метода DPD можно найти, например, в нашей недавней работе [49], посвященной статистической термодинамике гибкоцепных diblock-сополимеров, допированных наностержнями. Для расчетов использовался программный пакет LAMMPS.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Микрофазное разделение в блок-сополимере с изменяемым соотношением длины жесткого А и гибкого В блоков и постоянной суммарной длиной цепи $N = 20$ моделировали посредством плавного (с шагом 0.1) увеличения параметра отталкивания a_{AB} частиц разного сорта для исходно разупорядоченного состояния. Эта величина связана с параметром Флори–Хаггинса χ линейным соотношением $\chi = (0.306 \pm 0.003)(a_{AB} - a_{AA})$ [39]. Моделирование проводили в ячейке размером $32 \times 32 \times 32$, где за единицу длины принят радиус обрезки взаимодействий между DPD-частицами.

Различные микроструктуры в системе идентифицировали по появлению вторичных пиков на зависимости статического структурного фактора жесткого блока от величины волнового вектора (примеры см. в работе [50]). Ориентационное упорядочение детектировали визуально, а для его количественной оценки рассчитывали величину корреляционной функции $S_N(r)$ в зави-

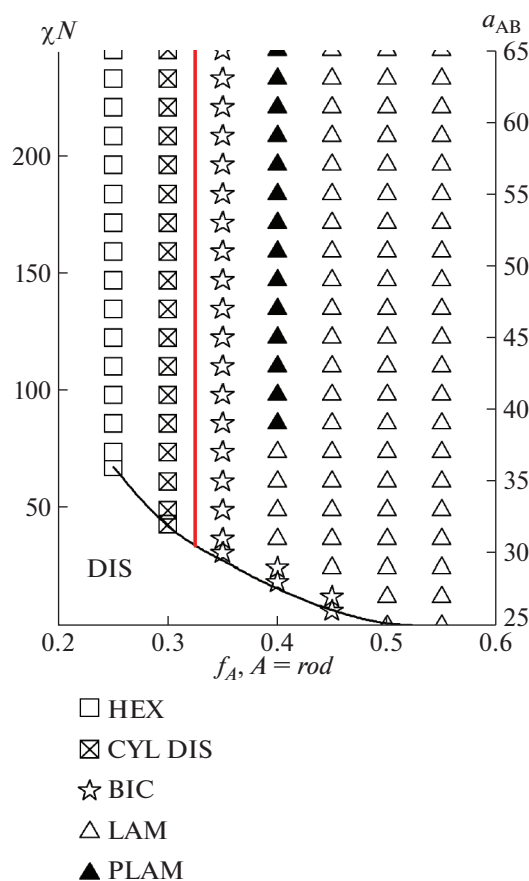


Рис. 1. Фазовая диаграмма диблок-сополимера стержень–клубок в координатах $\chi N - f_A$ (или $a_{AB} - f_A$) при $a_{AA} = a_{BB} = 25$. Морфологии: DIS – неупорядоченный гомогенный расплав, HEX – гексагонально упакованные цилиндрические домены, CYL DIS – разупорядоченные цилиндры, или длинные мицеллы, BIC – биконтинуальная морфология, PLAM – перфорированные ламели, LAM – ламели.

симости от расстояния r между связями А–А в стержнях

$$S_N(r) = \left\langle \frac{1}{2} [3(\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j)^2 - 1] \right\rangle,$$

где угловые скобки означают усреднение по 10^5 случайно выбранных пар связей А–А, принадлежащих разным стержням с ортами $\mathbf{n}_i$ и $\mathbf{n}_j$. В отсутствие дальнего ориентационного порядка $S_N \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, а в идеальном нематике $S_N = 1$.

На рис. 1 построена фазовая диаграмма диблок-сополимера АВ стержень–клубок в координатах $\chi N - f_A$ (мольная доля звеньев А в сополимере) для $a_{AA} = a_{BB} = 25$. С точки зрения микрофазного разделения диаграмма морфологически подобна фазовой диаграмме гибкоцепного диблок-сополимера, построенной методом DPD в работе [50]. Степень сегрегации звеньев А и В, отвечающая переходу беспорядок–порядок, зави-

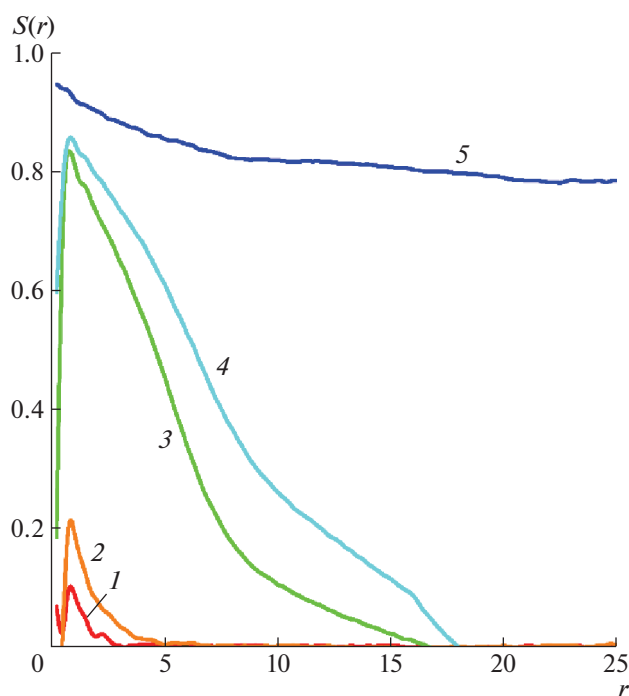


Рис. 2. Корреляционная функция $S_N(r)$ ориентации связей в жестких блоках А сополимера A_8B_{12} при степени сегрегации жестких и гибких блоков $a_{AB} = 25$ (DIS) (1), 27 (DIS) (2), 29 (BIC) (3), 31 (BIC) (4) и 33 (LAM) (5). При $a_{AB} = 27.5$ происходит микрофазное разделение с образованием биконтинуальной, при $a_{AB} = 30$ — ламелярной структуры.

сит от состава сополимера и растет с уменьшением длины жесткого блока.

При $f_A > 0.3$ ($N_A > 6$) в доменах, образованных жесткими блоками, наблюдается ориентационное упорядочение. Соответствующая область диаграммы на рис. 1 расположена справа от сплошной вертикальной линии.

Поведение ориентационной корреляционной функции $S_N(r)$ для сополимера A_8B_{12} при разной силе сегрегации звеньев блоков А и В показано на рис. 2. В случае слабой несовместимости ($a_{AB} = 25$ и 27) упорядочение проявляется лишь на расстояниях менее длины стержня, однако при увеличении a_{AB} расстояние, на котором S_N отлична от нуля (корреляционная длина ориентационного взаимодействия стержней), заметно возрастает. Для $a_{AB} = 29$ и 31 это расстояние сопоставимо с размером доменов, а при формировании ламелярной микроструктуры ($a_{AB} = 33$) превышает размер ячейки моделирования, что свидетельствует о возникновении дальнего порядка в расположении жестких блоков.

Структура возникающих морфологий представлена на рис. 3. В сополимере A_5B_{15} с коротким жестким блоком формируются гексагонально упорядоченные цилиндры (HEX). Удлинение

жесткого блока приводит к разупорядочению цилиндров (CYL DIS) для сополимера A_6B_{14} и биконтинуальной морфологии (BIC) — для A_7B_{13} . В сополимере A_8B_{12} образуются ламели (LAM), которые устойчивы и в сополимерах с более длинным жестким блоком А. Обнаружена также регулярная биконтинуальная структура, сходная с перфорированными ламелями (PLAM). Пока неясно, является ли данная структура кинетически стабильной.

Переход от изотропного к упорядоченному распределению жестких блоков наблюдается только в микрофазно-расслоенном состоянии сополимера. В отличие от результатов работы [32] это состояние обязательно отвечает ламелярной морфологии. При этом возникает исключительно смектик С, в котором уменьшение плотности цепей на единицу межфазной поверхности, повышающее конформационную энтропию гибких блоков, достигается наклоном стержней в ламелях. Как следует из рис. 3, направление директора смектической фазы изменяется от одной ламели к другой.

В дальнейшем представляет интерес построить фазовую диаграмму в координатах $\chi N - f_A$ при $N_A = 7$ или 8, варьируя длину гибкого блока и полную длину цепи сополимера, поскольку жесткие блоки такой длины всегда ориентационно упорядочены.

На рис. 4 приведены фазовая диаграмма и мгновенные снимки упорядоченных состояний, аналогичные представленным на рис. 1 и 3, но отвечающие более сильному отталкиванию идентичных звеньев: $a_{AA} = a_{BB} = 50$. Видно, что, с одной стороны, увеличение стерического отталкивания DPD-частиц облегчает ориентационное упорядочение стержней, которое возникает уже при $N_A = 6$. С другой стороны, существенно повышаются вязкость системы и время ее релаксации. При $N_A = 8$ не наблюдается заметных перестроек морфологии на временах порядка 10^7 шагов интегрирования, а при $N_A \geq 10$ релаксация дефектов микродоменной структуры за разумное время оказывается невозможной. При $N_A > 8$ жесткие блоки образуют структуру, по степени упорядоченности близкую к кристаллу.

В отдельных численных экспериментах, проведенных в ячейках меньшего размера ($20 \times 20 \times 20$), возникали экзотические структуры, встречающиеся в эксперименте: зигзагообразные ламели при $N_A = 10$, а также неупорядоченные фрагменты двуслойных ламелей при $N_A = 11$. Они показаны на рис. 5. Повторное моделирование в ячейках размером $32 \times 32 \times 32$ продемонстрировало, что эти морфологии метастабильны и не воспроизводятся, уступая место плоским однослойным ламелям.

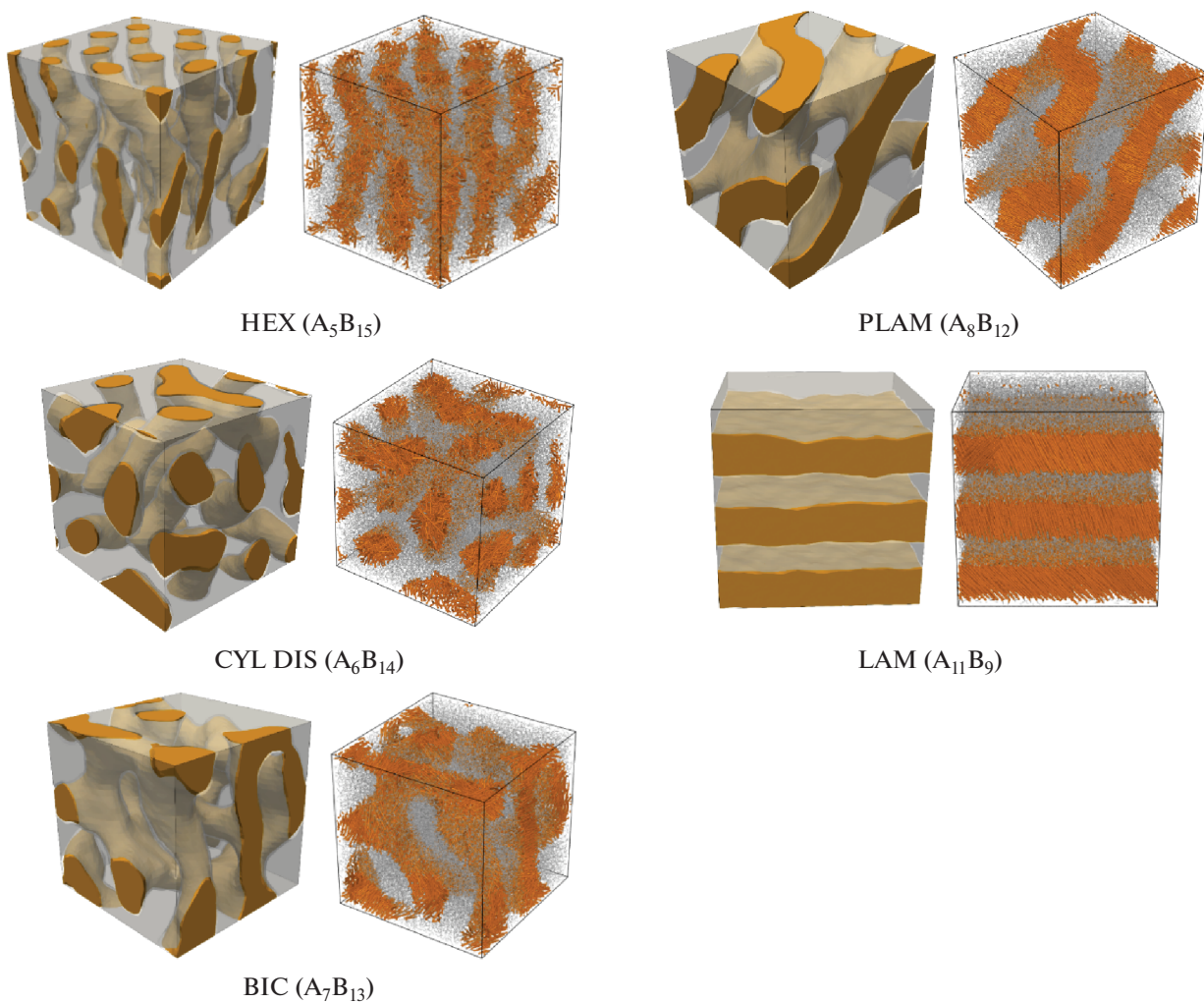


Рис. 3. Мгновенные снимки сополимеров стержень–клубок в различных упорядоченных состояниях. Слева показано строение межфазной поверхности, справа – расположение жестких (желтые) и гибких (серые) блоков сополимера. Цветные рисунки можно посмотреть в электронной версии журнала.

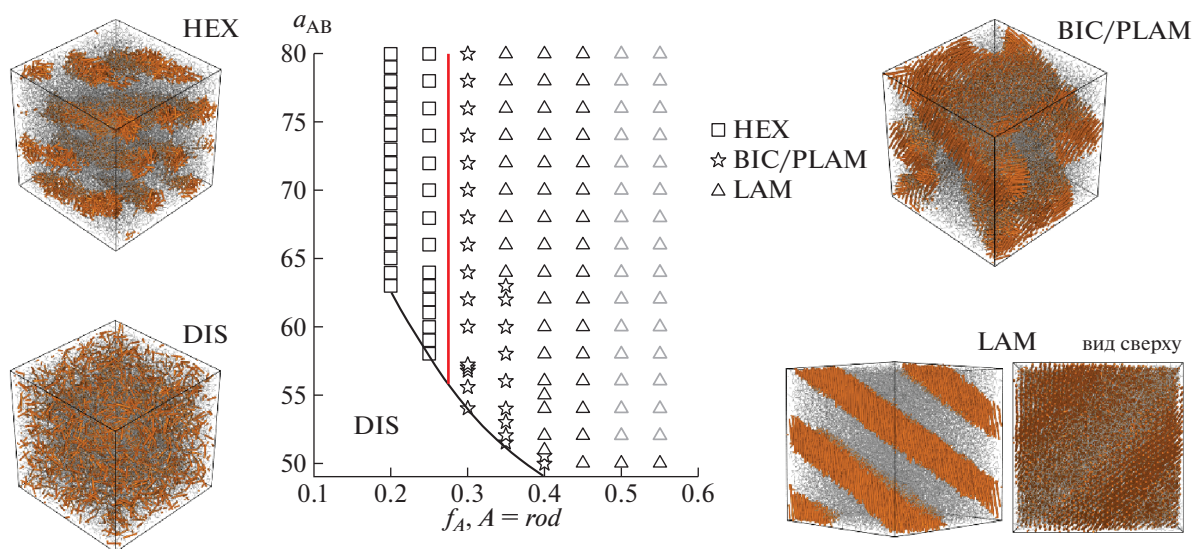


Рис. 4. Фазовая диаграмма диблок-сополимера стержень–клубок и мгновенные снимки различных морфологий при $a_{AA} = a_{BB} = 50$. Гексагональная упаковка жестких блоков показана на примере ламелярной структуры.

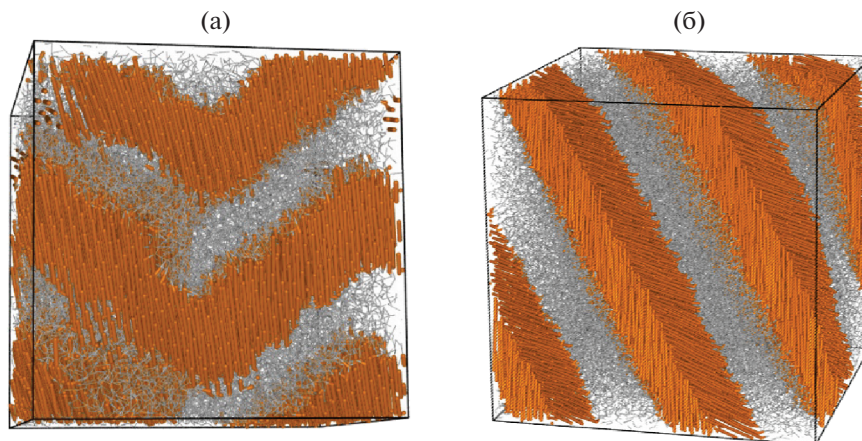


Рис. 5. Метастабильные морфологии, возникающие в ячейке размером $20 \times 20 \times 20$: а – зигзагообразные ламели ($N_A=10$, $a_{AA}=a_{BB}=a_{AB}=50$), б – разупорядоченные двуслойные ламели ($N_A=11$, $a_{AA}=a_{BB}=25$, $a_{AB}=50$).

Таким образом, при моделировании сополимеров стержень–клубок методом DPD в дальнейшем представляется более обоснованным использовать стандартное значение параметра отталкивания $a_{AA}=a_{BB}=25$, а проверку устойчивости возникающих морфологий проводить в ячейках большего размера.

Уточненная фазовая диаграмма диблок-сополимера стержень–клубок может быть использована для интерпретации лабораторных экспериментов и сопоставления с теоретическими расчетами.

А.В. Березкин признателен за возможность использования оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 16-13-10280).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. He M., Qiu F., Lin Z. // J. Mater. Chem. 2011. V. 21. № 43. P. 17039.
2. Lee Y., Gomez E.D. // Macromolecules. 2015. V. 48. № 20. P. 7385.
3. Lee M., Cho B.-K., Kim H., Zin W.-C. // Angew. Chem., Int. Ed. 1998. V. 37. № 5. P. 638.
4. Lee M., Cho B.-K., Kim H., Yoon J.-Y., Zin W.-C. // J. Am. Chem. Soc. 1998. V. 120. № 36. P. 9168.
5. Ryu J.-H., Lee M. // Struct. Bonding (Berlin). 2008. V. 128. P. 63.
6. Olsen B.D., Segalman R.A. // Macromolecules. 2006. V. 39. № 20. P. 7078.
7. Sary L.R.N., Brochon C., Hadziioannou G., Ruokolainen J., Mazzenga R. // Macromolecules. 2007. V. 40. № 19. P. 6990.
8. Radzilowski L.H., Wu J.L., Stupp S.I. // Macromolecules. 1993. V. 26. № 4. P. 879.
9. Radzilowski L.H., Stupp S.I. // Macromolecules. 1994. V. 27. № 26. P. 7747.
10. Radzilowski L.H., Carragher B.O., Stupp S.I. // Macromolecules. 1997. V. 30. № 7. P. 2110.
11. Chen J.T., Thomas E.L., Ober C.K., Hwang S.S. // Macromolecules. 1995. V. 28. № 5. P. 1688.
12. Chen J.T., Thomas E.L., Ober C.K., Mao G.O. // Science. 1996. V. 273. № 5273. P. 343.
13. Ryu J.-H., Oh N.-K., Zin W.-C., Lee M.J. // J. Am. Chem. Soc. 2004. V. 126. № 11. P. 3551.
14. Jenekhe S.A., Chen X.L. // Science. 1998. V. 279. № 5358. P. 1903.
15. Lee M., Cho B.-K., Ihn K.J., Lee W.-K., Oh N.-K., Zin W.-C. // J. Am. Chem. Soc. 2001. V. 123. № 19. P. 4647.
16. Horsch M.A., Zhang Z.L., Glotzer S.C. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. № 5. P. 056105.
17. Horsch M.A., Zhang Z.L., Glotzer S.C. // J. Chem. Phys. 2006. V. 125. № 18. P. 184903.
18. Horsch M.A., Zhang Z.L., Glotzer S.C. // Soft Matter. 2010. V. 6. № 5. P. 945.
19. Chen J.Z., Zhang C.X., Sun Z.Y., Zheng Y.S., An L.J. // J. Chem. Phys. 2006. V. 124. № 10. P. 104907.
20. Chen J.Z., Zhang C.X., Sun Z.Y., An L.J., Tong Z.J. // J. Chem. Phys. 2007. V. 127. № 2. P. 024105.
21. Chen J.Z., Sun Z.Y., Zhang C.X., An L.J., Tong Z.J. // J. Chem. Phys. 2008. V. 128. № 7. P. 074904.
22. Song W.D., Tang P., Qiu F., Yang Y.L., Shi A.C. // Soft Matter. 2011. V. 7. № 3. P. 929.
23. AlSunaidi A., den Otter W.K., Clarke J.H.R. // Philos. Trans. R. Soc. London. 2004. V. 362. № 1821. P. 1773.
24. AlSunaidi A., den Otter W.K., Clarke J.H.R. // J. Chem. Phys. 2009. V. 130. № 12. P. 124910.
25. Halperin A. // Macromolecules. 1990. V. 23. № 10. P. 2724.
26. Williams D.R.M., Fredrickson G.H. // Macromolecules. 1992. V. 25. № 13. P. 3561.
27. Müller M., Schick M. // Macromolecules. 1996. V. 29. № 27. P. 8900.

28. Matsen M.W., Barrett C. // J. Chem. Phys. 1998. V. 109. № 10. P. 4108.
29. Pryamitsyn V., Ganesan V. // J. Chem. Phys. 2004. V. 120. № 12. P. 5824.
30. Shah M., Pryamitsyn V., Ganesan V. // Macromolecules. 2008. V. 41. № 1. P. 218.
31. Kriksin Yu.A., Khalatur P.G. // Macromol. Theory Simul. 2012. V. 21. № 6. P. 382.
32. He L., Chen Z., Zhang R., Zhang L., Jiang Zh. // J. Chem. Phys. 2013. V. 138. № 9. P. 094907.
33. Yan L.-T., Xie X.-M. // Prog. Polym. Sci. 2013. V. 38. № 2. P. 369.
34. He L., Zhang L., Xia A., Liang H. // J. Chem. Phys. 2009. V. 130. № 14. P. 144907.
35. He L., Zhang L., Chen H., Liang H. // Polymer. 2009. V. 50. № 14. P. 3403.
36. He L., Zhang L., Liang H. // Polymer. 2010. V. 51. № 14. P. 3303.
37. Chai A., Zhang D., Jiang Y., He L., Zhang L. // J. Chem. Phys. 2013. V. 139. № 10. P. 104901.
38. Zhang Z., Li T., Nies E. // Macromolecules. 2014. V. 47. № 15. P. 5416.
39. Groot R.D., Warren P.B. // J. Chem. Phys. 1997. V. 107. № 11. P. 4423.
40. Chou S.-H., Tsao H.-K., Sheng Y.-J. // J. Chem. Phys. 2011. V. 134. № 3. P. 034904.
41. Chou S.-H., Wu D.T., Tsao H.-K., Sheng Y.-J. // Soft Matter. 2011. V. 7. № 19. P. 9119.
42. Liba O., Kauzlaric D., Abrams Z.R., Hanein Y., Greiner A., Korvink J.G. // Mol. Simul. 2008. V. 34. № 8. P. 737.
43. Zhou Ch., Luo S.-K., Sun Y., Zhou Y., Qian W. // J. Appl. Polym. Sci. 2016. V. 133. № 41. P. 44098.
44. Levine Y.K., Gomes A.E., Martins A.F., Polimeno A. // J. Chem. Phys. 2005. V. 122. № 14. P. 144902.
45. Zhang Z., Guo H. // J. Chem. Phys. 2010. V. 133. № 14. P. 144911.
46. Li X., Huang F., Jiang T., He X., Lin S., Lin J. // RSC Adv. 2015. V. 5. № 2. P. 1514.
47. Miller T.F., Eleftheriou M., Pattnaik P., Ndirango A., Newns D., Martyna G.J. // J. Chem. Phys. 2002. V. 116. № 20. P. 8649.
48. Polimeno A., Gomes A., Martins A.F. Computer Simulation of Liquid Crystals and Polymers, NATO Science Series II / Ed. by P. Pasini, C. Zannoni, S. Žumer. Dordrecht: Kluwer, 2005. V. 177
49. Berezkin A.V., Kudryavtsev Y.V., Gorkunov M.V., Osipov M.A. // J. Chem. Phys. 2017. V. 146. № 14. P. 144902.
50. Gavrilov A.A., Kudryavtsev Y.V., Chertovich A.V. // J. Chem. Phys. 2013. V. 139. № 22. P. 224901.