

УДК 532.74

АРГОН И ВОДА

Г.Г. Маленков

Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва
E-mail: egor38@mail.ru

Статья поступила 5 апреля 2013 г.

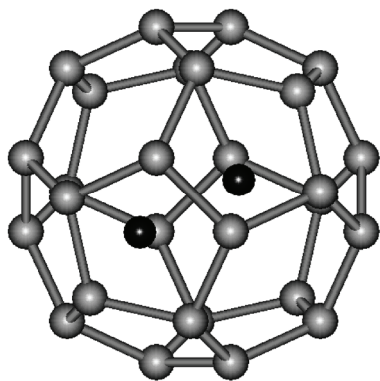
Компьютерное моделирование жидких аргона и воды показало, что характер структурной неоднородности, выявляемый окраской их мгновенных структур по объемам многогранников Вороного, одинаков для обеих жидкостей. Рассматриваются особенности динамики атомов аргона в полости клатратного гидрата и в жидкой воде. Атомы аргона, включенные в сетку водородных связей, существующую в жидкой воде, участвуют в согласованных движениях. В результате этих согласованных движений расстояние между двумя атомами аргона может колебаться вокруг некоторой величины в течение достаточно длительного времени. Окружение атомов аргона в жидком водном растворе довольно сильно отличается от их окружения в клатратных гидратах.

Ключевые слова: вода, жидкий аргон, структура, молекулярная динамика.

ВВЕДЕНИЕ

Жидкие аргон и воду часто противопоставляют друг другу. Действительно, аргон — типичная жидкость, взаимодействия между частицами которой сферически-симметричны, тогда как связи между молекулами воды (водородные связи средней силы) направлены к вершинам тетраэдра, построенного вокруг атома кислорода, и образуют трехмерную сетку. В работах Н.П. Маломужа с соавторами часто свойства аргона сравниваются со свойствами воды. Одна из них так и называется: "To what extent are thermodynamic properties of water argon-like?" [1].

Известно четыре гидрата аргона. При низких давлениях образуется кубический клатратный гидрат, открытый в конце XIX в. Вияром вскоре после обнаружения самого аргона в земной атмосфере [2]. Кристаллическая структура этого гидрата была установлена только в 80-е годы XX в. [3, 4]. Оказалось, что структура этого гидрата относится к структурному типу КС II, причем более крупные 16-гранные пустоты (12 5-угольных и 4 6-угольные грани) могут заполняться двумя атомами аргона (см. также [5, 6]), как показано на рис. 1. В пентагондодекаэдрических пустотах располагается по одному атому аргона. Этот гидрат устойчив до давления приблизительно 5 кбар. При более высоких давлениях образуются другие гидраты (рис. 2). В интервале давлений 5—8 кбар устойчив гидрат с гексагональной структурой ГС III. Водный каркас в этом гидрате представляет собой упаковку 20-гранни-



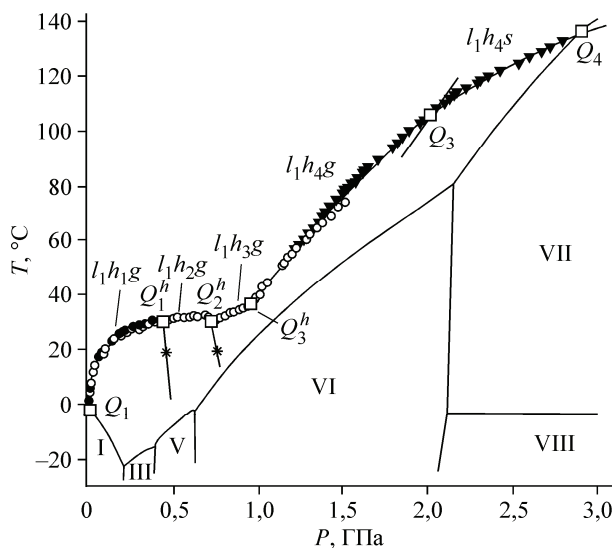
ваться двумя атомами аргона (см. также [5, 6]), как показано на рис. 1. В пентагондодекаэдрических пустотах располагается по одному атому аргона. Этот гидрат устойчив до давления приблизительно 5 кбар. При более высоких давлениях образуются другие гидраты (рис. 2). В интервале давлений 5—8 кбар устойчив гидрат с гексагональной структурой ГС III. Водный каркас в этом гидрате представляет собой упаковку 20-гранни-

Рис. 1. Два атома аргона в большой полости водного каркаса КС II гидрата аргона.

Серые шарики — атомы кислорода молекул воды, черные — атомы аргона. Показаны водородные связи

Рис. 2. Фазовая диаграмма аргон—вода [8]

ков (12 5-угольников и 8 6-угольников) и 12-гранников двух видов (пентагональных додекаэдров — 12 5-угольных граней и 12-гранников с тремя квадратными, шестью 5-угольными и тремя 6-угольными гранями). В 20-гранных пустотах может разместиться до пяти атомов аргона. При давлениях между 8 и 11 кбар существует тетрагональный гидрат со структурой ТС IV. Водный его каркас представляет собой упаковку 14-гранников Уильямса (2 4-угольных, 8 5-угольных и 4 6-угольные грани). В них размещается по два атома аргона. При давлениях выше 11 кбар существует ромбический гидрат РС II, водный каркас которого не содержит выпуклых многогранников. Этот каркас несколько напоминает структуру льда Ih и содержит неплоские гексагональные кольца. Атомы аргона расположены в каналах, образованных этими кольцами. При давлениях выше 61 кбар гидрат со структурой РС II распадается на лед VII и кристаллический аргон. На диаграмме показаны также зависимости температур плавления от давления модификаций кристаллических льдов и линии взаимных переходов этих модификаций друг в друга. Кривая начала кристаллизации гидратов аргона во всем исследованном интервале давлений лежит выше линии кристаллизации льдов. Все давления переходов между гидратами приведены для температуры, близкой к комнатной. Ниже приведены стехиометрические составы упомянутых гидратов аргона. Диаграмма состояния аргон—вода не уникальна. В системе азот—вода также найдено четыре гидрата с такой же, как у аргона, последовательностью (с ростом давления) образования гидратов [7, 8] (там же см. более подробное описание структур и ссылки на оригинальные работы, в которых эти структуры были определены).



Стехиометрический состав гидратов аргона

Структура водного каркаса	КС II	ГС III	ТС IV	РС II
Состав	Ar·4,5H ₂ O	Ar·3,4H ₂ O	Ar·3H ₂ O	Ar·2H ₂ O

Вода — самое распространенное вещество на Земле, аргон — минорный компонент земной атмосферы (его содержание около 1 %). Растворимость аргона в воде, как и большинства газов, уменьшается с ростом температуры (исключением является гелий, растворимость которого минимальна при 30 °С). После того как была установлена кристаллическая структура, а следовательно, и природа клатратных гидратов в конце 40-х — начале 50-х годов XX в. Штакельбергом [9], стали появляться спекулятивные рассуждения о том, что окружение молекул малорастворимых гидрофобных веществ в водных растворах должно напоминать их окружение в клатратных гидратах [10, 11]. Это означало бы, что они находятся внутри многогранников, содержащих много 5-угольных граней, построенных из молекул воды, соединенных водородными связями. Эти спекуляции стали распространяться и на растворы хорошо растворимых в воде веществ, способных образовывать клатратные гидраты (этиловый спирт, диоксан, ацетон, окись этилена и многие другие) [12]. В наших работах [13, 14] методом молекулярной динамики моделировались тонкие пленки воды, находящиеся в атмосфере аргона. Некоторые результаты моделирования раствора аргона в воде приводятся в [15]. При моделировании этих систем было показано, что окружение атомов аргона в жидком водном растворе сильно отличается от наблюдаемого в клатратных гидратах. Но в статьях [13—15] обсуждаются динамические аспекты этих систем и только вскользь упоминается структура. В данной статье структурные вопросы будут обсуждены более подробно.

Жидкий аргон — один из любимейших (наряду с водой) объектов компьютерного моделирования. Аргон моделировал один из пионеров молекулярной динамики А. Рахман [16]. Литература по моделированию аргона почти столь же необозрима, как и по моделированию воды. Приведу ссылки на пару публикаций, появившихся в последнее десятилетие [17, 18]. В предлагаемой статье будут рассматриваться вопросы неоднородности структуры жидкого аргона и некоторые другие проблемы, обычно не затрагиваемые другими исследователями.

Система аргон—вода тоже неоднократно моделировалась на компьютере. В 1970—80-х гг. эту систему в основном исследовали в контексте гидрофобных взаимодействий [19, 20]. Из работ, в которых изучали структуру аргона и других благородных газов в воде, можно упомянуть [21]. В нашей работе [6] было показано, что два атома аргона комфортно размещаются в большой полости клатрата. Этот результат согласуется с экспериментом. Некоторые особенности поведения этих атомов в полостях клатратного каркаса демонстрируются в [13]. Здесь будет приведена дополнительная информация о поведении атомов аргона в большой полости КС II. Жидкие растворы аргона тоже изучались нами [15]. В этой публикации обсуждались только результаты, свидетельствующие о проявлениях согласованности в движении атомов аргона, включенных в сетку водородных связей, образованную молекулами воды. В предлагаемой статье будет уделено внимание структуре окружения атомов аргона в жидкой воде.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Все обсуждаемые в этой статье результаты получены при помощи компьютерного моделирования (молекулярная динамика). Для моделирования жидкого аргона был использован пакет компьютерных программ, составленный группой Н.К. Балабаева (Институт математических проблем биологии РАН в Пущино). Периодическая кубическая ячейка содержала 4000 атомов. Моделирование проводили преимущественно в *NTP* ансамбле при разных плотностях и температурах. Для вычисления взаимодействия между атомами аргона использовали потенциал Леннарда-Джонса. Его параметры подбирали путем проведения пробных расчетов кристаллического и жидкого аргона при температуре 100 К. Плотность кристаллического аргона при давлении 92 МПа оказалась 1,699 г/см³, плотность жидкого аргона при этой температуре и при давлении 73 МПа была равной 1,489 г/см³. Эти величины достаточно близки к экспериментальным значениям, приведенным в [22]. Моделирование жидкой воды и растворов аргона в воде проводили с помощью программ, составленных Е.А. Желиговской. Программы были модифицированы автором. Взаимодействия вода—вода в них описывались атом-атомными потенциальными функциями, предложенными в [23]. Ячейка клатратного гидрата типа КС II содержала 1088 молекул воды. Длина ребра куба составляла 34,334 Å (удвоенный параметр элементарной ячейки кристалла). В нашей ячейке содержалось 64 больших и 128 малых пустот. Все пустоты были заполнены атомами аргона. В некоторых больших пустотах было помещено по два атома благородного газа.

Начальная конфигурация раствора аргона в воде была получена следующим образом. В центре периодической ячейки объемной воды была построена сфера радиусом 9 Å. Она содержала 103 молекулы воды. Эти молекулы были "превращены" в атомы гелия. После многих десятков пикосекунд виртуального времени атомы гелия были "превращены" в атомы аргона. Исходя из этой конфигурации, было произведено моделирование системы в течение 96 пс. Последняя конфигурация, полученная на этой траектории, стала исходной для дальнейшего моделирования. Взаимодействие атомов аргона с молекулами воды описывали потенциалами Леннарда-Джонса. Параметры потенциалов аргон—кислород и аргон—водород были подобраны автором [6]. За основу были приняты параметры, взятые из книги [24]. Они были слегка модифицированы после пробных расчетов взаимодействия атомов аргона в полостях клатрата со структурой КС II и с учетом результатов работы [25]. Наши потенциалы (как вода—вода, так и аргон—вода) отличаются от большинства используемых в литературе тем, что они включают атом-атомные потенциалы водород—водород, водород—кислород и аргон—водород.

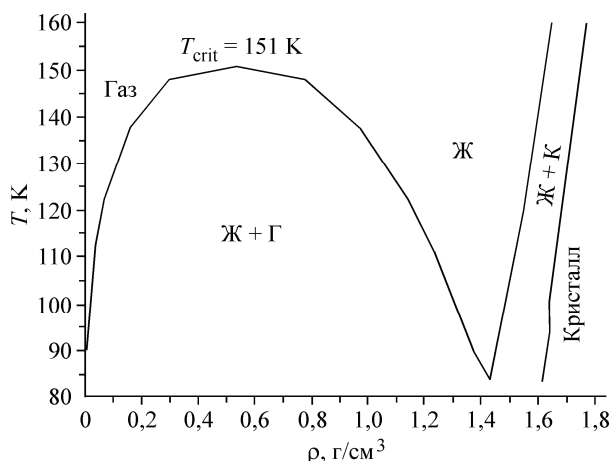


Рис. 3. Фазовая диаграмма аргона.

При ее построении использованы данные из International Critical Tables of Numerical Data. Physics, Chemistry and Technology. – Vol. III, P. 203. – N.Y.—L.: McGraw-Hill Book Company, 1928 (равновесие газ—жидкость) и [22] (равновесие кристалл—жидкость)

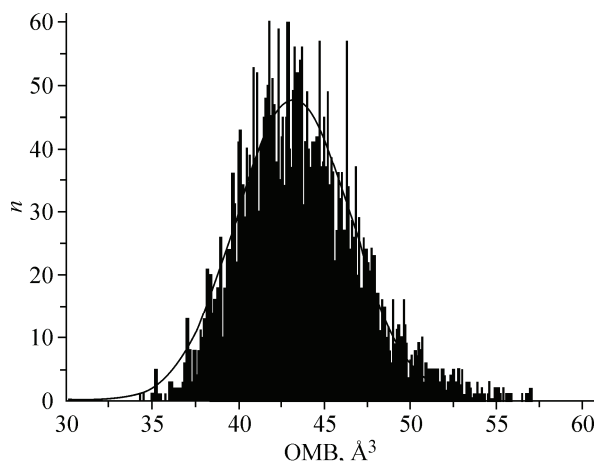


Рис. 4. Распределение ОМВ в мгновенной конфигурации жидкого аргона из 4000 атомов.

Показана аппроксимация гауссовой кривой

ЖИДКИЙ АРГОН

Нами было проведено моделирование жидкого аргона при разных температурах и плотностях. Обсуждаемые в этом разделе результаты относятся к температуре 110 К и плотности 1,513 г/см³. Это очень близко к температуре кристаллизации аргона при этой плотности. Большинство траекторий получено в ансамблях *NPT* и *NVT*. Средняя потенциальная энергия была 1,40 ккал/моль, среднее давление 1,24 кбар. Фазовая диаграмма аргона приведена на рис. 3.

На рис. 4 показано распределение по объемам многогранников Вороного (ОМВ), построенных вокруг атомов аргона. Значение объемов лежат в пределах 34—55 Å³. Среднее значение ОМВ аргона для данной плотности составляет 43,8 Å³. Нами была использована процедура окраски атомов аргона по ОМВ, которую мы применяли для изучения структурной неоднородности воды [26, 27]. Подробно она описана в [28]. Суть этой процедуры следующая (в варианте, использованном нами для изучения структурной неоднородности аргона).

1. Выбирали одну из конфигураций, полученных в ходе компьютерного эксперимента.
2. Для всех атомов аргона этой конфигурации составляли список ОМВ при помощи программы, любезно предоставленной В.П. Волошиным и слегка модифицированной автором.
3. Строили ранговое распределение ОМВ при помощи коммерческой программы "Origin". По этому распределению находили значения ОМВ, разделяющие атомы аргона на классы по значениям ОМВ. Например, все атомы делили на два равных класса с ОМВ, меньшим некоторой величины (50 % атомов) и большей этой же величины (50 % атомов). Можно было выбрать любую долю атомов с самыми маленькими и самыми большими значениями ОМВ.
4. При помощи коммерческой программы HyperChem рисовали картинки, на которых атомы с малыми значениями ОМВ окрашиваются в один цвет, а с большими значениями — в другой. При этом атомы с малыми значениями ОМВ изображали шарами с меньшим диаметром, чем атомы с большими значениями ОМВ (рис. 5).
5. При помощи специальной компьютерной программы в списке атомов с малыми и большими значениями ОМВ искали атомы, имеющие соседей, удаленных не далее чем на величину r_{\max} . При помощи HyperChem рисовали картинку, в которой атомы, удаленные друг от друга на расстояние, меньшее r_{\max} , соединяли связями.

В случае воды мы использовали значение $r_{\max} = 3,3 \text{ \AA}$ или 4 \AA (т.е. мы не стремились соединить молекулы водородными связями, нам было важно, чтобы данная подсистема молекул об-

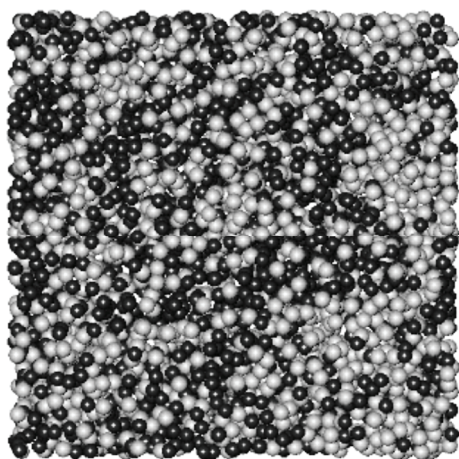


Рис. 5. Аргон, $T = 110$ К, плотность = $1,513$ г/см³.
Окраска по ОМВ: серые — $ОМВ > 43,54 \text{ \AA}^3$, черные — $ОМВ < 43,54 \text{ \AA}^3$;
по 2000 атомов каждого сорта

развала бесконечный кластер, см. рис. 14 и 15 в [26] и 8 и 9 в [27]). Для жидкого аргона мы соединяли атомы, разделенные расстоянием не более чем $4,4 \text{ \AA}$. В качестве примера мы приводим окраску атомов аргона по значениям ОМВ для одной мгновенной структуры аргона. На рис. 5 окрашено 2000 атомов с самыми большими значениями ОМВ и 2000 (из 4000) атомов с самыми маленькими значениями ОМВ. На рис. 6 показана окраска 1000 молекул с самыми большими и с самыми маленькими величинами ОМВ и соответствующие этой окраске кла-

стеры из атомов аргона. Для сравнения на рис. 7 показана окраска мгновенной конфигурации

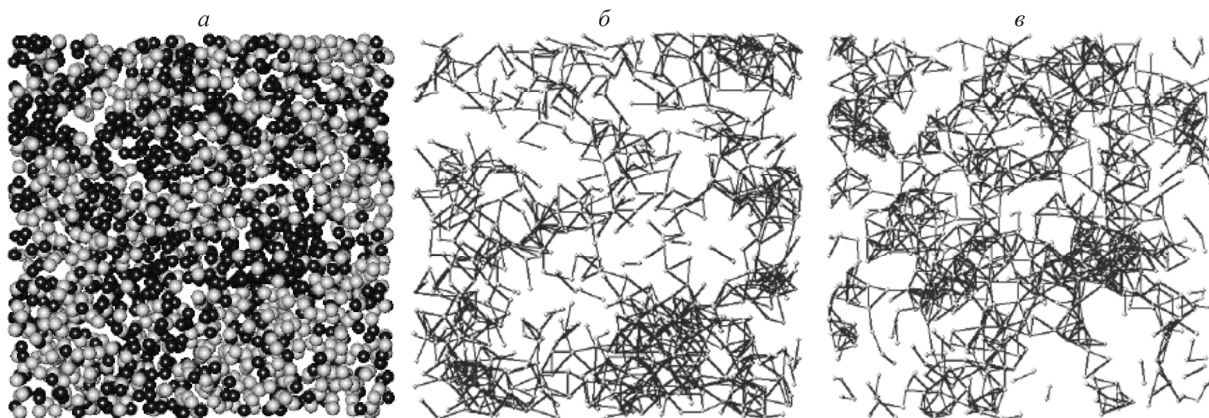


Рис. 6. Аргон, 110 К, $d = 1,513$ г/см³.

4000 атомов. Окраска атомов ОМВ: черные шары — $ОМВ < 41,37 \text{ \AA}^3$, серые шары — $ОМВ > 45,97 \text{ \AA}^3$; по 1000 атомов каждого сорта (а); та же конфигурация. Показаны атомы с $ОМВ < 41,97 \text{ \AA}^3$, имеющие соседей, удаленных не более чем на $4,4 \text{ \AA}$. Такие атомы соединены условными связями, их 942 (б); та же конфигурация. Показаны атомы с $ОМВ > 45,97 \text{ \AA}^3$, имеющие соседей, удаленных не более чем на $4,4 \text{ \AA}$. Такие атомы соединены условными связями, их 906 (в)

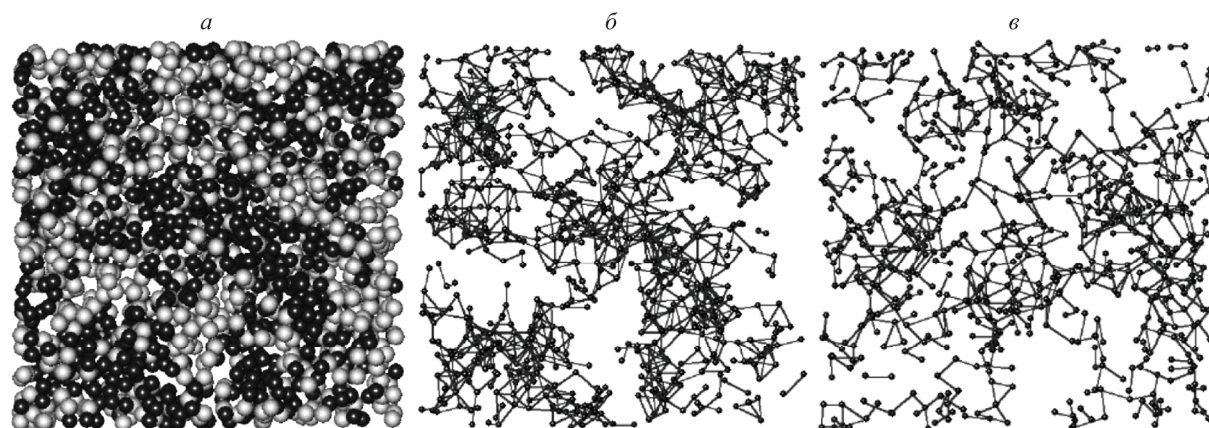


Рис. 7. Окраска молекул воды по ОМВ. Мгновенная конфигурация содержит 3454 молекул. $T = 298$ К. Окрашено по 25 % молекул с самыми маленькими ($ОМВ < 27,32 \text{ \AA}^3$) и с самыми большими многогранниками Вороного ($ОМВ > 32,03 \text{ \AA}^3$). Каждого сорта молекул по 864 штуки (а); молекулы с $ОМВ < 27,32 \text{ \AA}^3$. Соединены условными связями, их 808 (б); молекулы с $ОМВ > 32,03 \text{ \AA}^3$. Соединены условными связями, их 717, $R^{\max} = 4 \text{ \AA}$ (в)

воды по ОМВ для модели, содержащей 3456 молекул в независимой периодической ячейке. Видно, что 25 % молекул с самыми малыми и с самыми большими значениями ОМВ при таких значениях r_{\max} образуют бесконечный кластер как в случае воды, так и в случае аргона. В состав этого кластера входит большая часть молекул с такими значениями ОМВ. Конкретное количество молекул, вошедших в состав бесконечного кластера, указано в подписях под рисунками. Остальные молекулы и атомы не образуют связей (в случае аргона это слово следует поставить в кавычки, как и в случае воды, если $r_{\max} = 4 \text{ \AA}$) или входят в состав очень маленьких кластеров (2—3 молекулы). Интересно, что в бесконечный кластер, образованный молекулами (атомами) с большими значениями ОМВ, входит меньшее число частиц, чем в кластер из частиц с малыми значениями ОМВ — как для воды, так и для аргона. Координационное число молекулы воды в жидкой воде немного превышает 4. В жидком аргоне оно около 10. Разумеется, эти числа зависят от способа их определения. Взаимодействия между атомами аргона, в отличие от воды, не направлены, поэтому сходство рис. 6 и 7 кажется, на первый взгляд, удивительным. Но если мы посмотрим на рис. 8 и 9, на которых показаны распределения атомов аргона и молекул воды по числу "связей" (т.е. по числу соседей, удаленных от данной молекулы менее чем r_{\max}) в каждой из подсистем, то видно, что для воды и аргона они мало различаются. Во

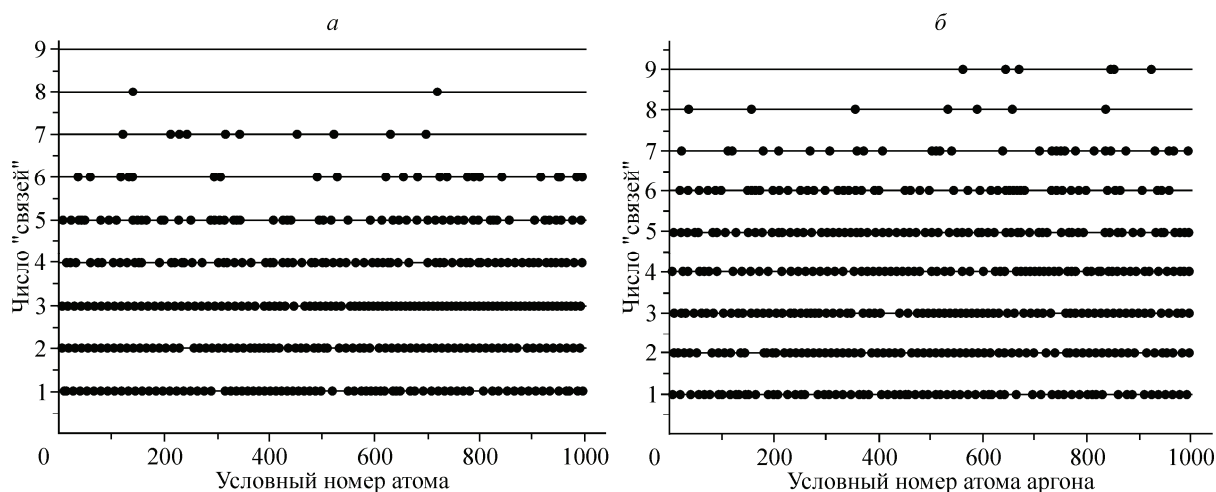


Рис. 8. Зависимость числа "связей" от условного номера атома аргона: атомы с ОМВ $< 41,37 \text{ \AA}^3$, среднее число связей 3,37 (а); атомы с ОМВ $> 45,97 \text{ \AA}^3$, среднее число связей 2,77 (б)

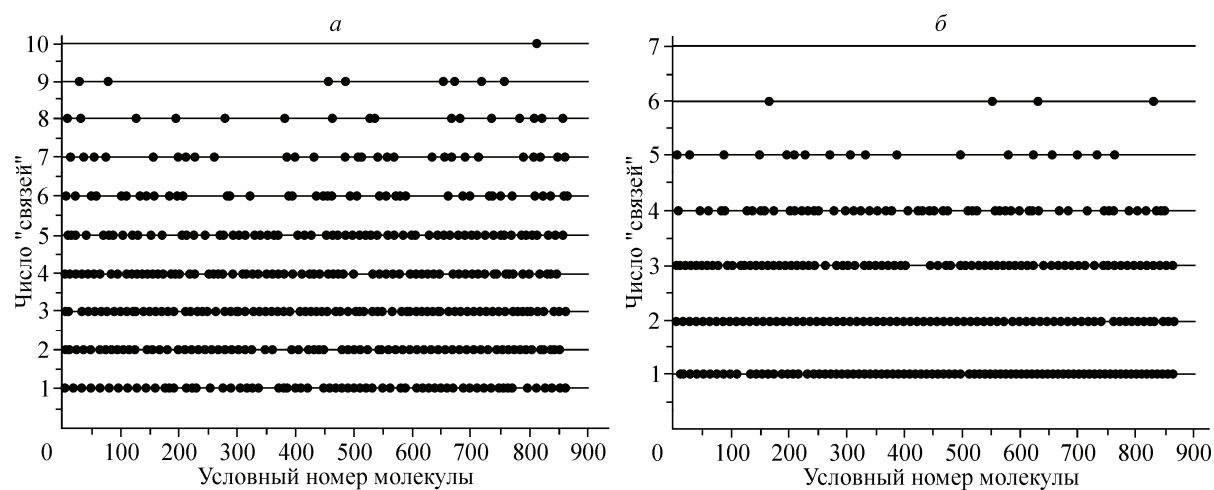


Рис. 9. Зависимость числа "связей" от условного номера молекулы воды: молекулы с ОМВ $< 27,32 \text{ \AA}^3$, среднее число связей 3,38 (а); молекулы с ОМВ $> 32,03 \text{ \AA}^3$, среднее число связей 2,15 (б)

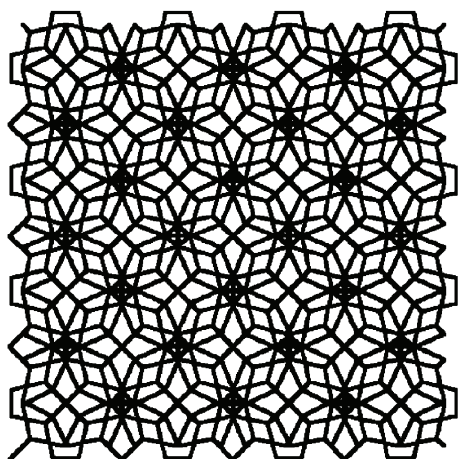


Рис. 10. Система водородных связей в водном каркасе клатрата со структурой КС II

всяком случае, сходство структурной неоднородности, выявленной по неравномерному распределению в пространстве частиц с маленькими и большими значениями ОМВ таких разных жидкостей, как вода и аргон, демонстрирует некие общие для всех жидкостей фундаментальные закономерности.

РАСТВОРЫ АРГОНА В ВОДЕ

Начнем с клатратного гидрата аргона со структурой КС II. Его в контексте данной статьи можно рассматривать как твердый раствор аргона в гипотетической модификации льда, структура которой — пустой каркас КС II (рис. 10 — сетка водородных связей в этом каркасе). В работе [6] было показано, что в крупных пустотах этого каркаса могут разместиться два атома аргона (в соответствии с экспериментальными данными [7]). В работе [13] обсуждались некоторые аспекты динамики этих двух молекул. Было показано, что в крупной 16-гранной полости имеются две области, в которых располагаются атомы аргона. На рис. 11, *a* показана зависимость расстояния между этими атомами от времени. Атомы иногда меняются местами (см. рис. 11, *b* и *в*), но это никак не отражается на поведении функции $r_{\text{Ar-Ar}}(t)$. На рис. 11, *в* видно, что области, в которых мигрируют атомы аргона перед тем, как поменяться местами, довольно обширные. Суммарная длина траекторий при 167 К составляла около 0,5 нс. Ни разу не наблюдали выход атомов аргона из полостей. Было проведено моделирование и при более низких температурах. Амплитуда колебания расстояния $r_{\text{Ar-Ar}}$, естественно, уменьшается с понижением температуры.

Моделирование жидкого водного раствора аргона (103 атома аргона и 3353 молекулы воды, т.е. мольная доля аргона составляла 0,003) проводили при виртуальной температуре 298 К. Коэффициент самодиффузии D аргона составлял $2,6 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$, т.е. очень близок к величине D воды в нашей модели ($2,7 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$, 3456 молекул, 298 К). Экспериментальное значение D , определенное методом ЯМР (спин-эхо), составляет $2,3 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ [29]. Величина D , определенная из данных по молекулярно-динамическому моделированию, зависит от радиуса обрезания (точнее, радиуса начала сглаживания) межмолекулярного потенциала. В модели, содержащей 3456 молекул, радиус обрезания был равен 10 \AA . При меньшем радиусе обрезания и меньшем числе молекул в системе величина D несколько меньше. Так, для системы, содержащей 576 молекул и при радиусе обрезания $7,4 \text{ \AA}$, средняя величина D составляет $2,5 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$. Зави-

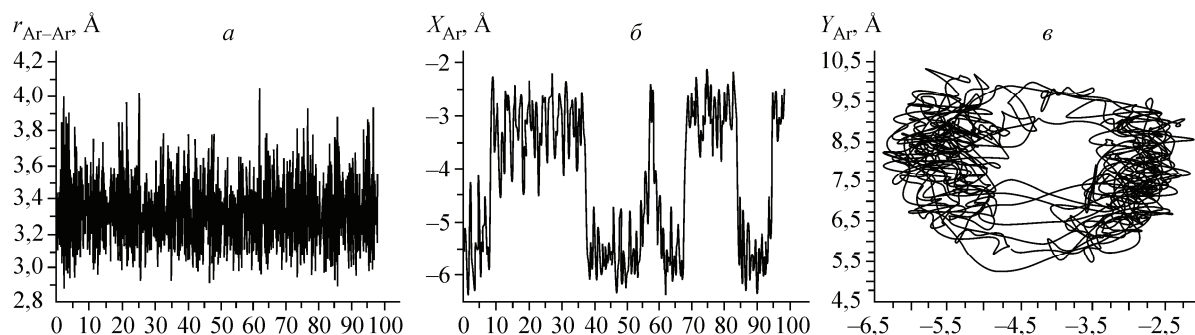
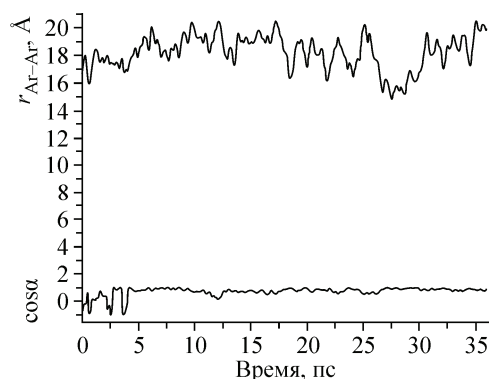


Рис. 11. Зависимость расстояния между атомами аргона, находящимися в большой полости каркаса КС II от времени (пс), $T = 267 \text{ К}$, среднее расстояние $3,45 \text{ \AA}$ (*a*); зависимость координаты x одного из атомов аргона в большой полости каркаса КС II от времени (*b*); зависимость координаты x одного из атомов в большой полости каркаса КС II от координаты y того же атома (*в*)

Рис. 12. Верхняя кривая: зависимость расстояния между двумя атомами аргона в водном растворе. На протяжении всего времени оно колебалось в пределах 16—20 Å. Нижняя кривая — зависимость косинуса угла между векторами их смещения (коэффициент корреляции их смещения). Пока векторы смещения были короткими, величина косинуса колебалась между -1 и $+1$. После 4 пс она приблизилась к единице



симость величины D от температуры, рассчитанная для этой модели в сравнении с экспериментальными данными, приведена на рис. 1 в нашей статье [13].

Атомы аргона, будучи вовлеченными в пространственную сетку водородных связей, образованную молекулами воды, участвуют в согласованных (коллективных) движениях. Одним из признаков этой согласованности является постоянство расстояния между частицами в течение достаточно длительного времени [13, 15]. Здесь мы показываем для примера зависимость расстояния между двумя атомами аргона и зависимость косинуса угла между векторами смещения этих атомов (рис. 12). Этот косинус является мерой корреляции в движении двух атомов. Подробнее об этих косинусах см. в [13].

Чтобы посмотреть на структуры гидратной оболочки аргона в водном растворе, мы написали специальную компьютерную программу, позволяющую нарисовать картину расположения молекул воды в сфере любого радиуса вокруг любого атома аргона. Молекулы воды при этом соединяли водородными связями. Картины создавали при помощи коммерческой программы HyperChem. Было рассмотрено много десятков таких картинок. Ни на одной из них атом аргона не находился в полости, похожей на наблюдаемые в клатратных гидратах, т.е. содержащей большое число плоских 5- и 6-угольных граней. То, что грани должны быть плоскими, является, на мой взгляд, необходимым критерием клатратоподобности полости. То, что атомы аргона должны находиться в полостях водной сетки, тривиально. О полостях в сетке водородных связей жидкой воды см. в [26] (стр. S17—S19). Напомню, что радиус атома аргона составляет 1,92 Å (половина межатомного расстояния в кристаллическом аргоне). Следовательно, расстояние между атомом аргона и ближайшей к нему молекулой воды должно быть около 3,3 Å. Полостей, эффективный радиус которых превышает эту величину, в компьютерных моделях воды довольно мало. Атомы и молекулы, растворяясь в воде, сами создают для себя полости. Но похожи ли они на полости, наблюдаемые в клатратных гидратах? На наш взгляд — не очень. На рис. 13 показано несколько примеров окружения атомов аргона молекулами воды. Были выбраны изображения окружения, наиболее, по нашему мнению, похожие на клатратные полости. Пусть читатель решит сам, насколько велико (или невелико) это сходство.

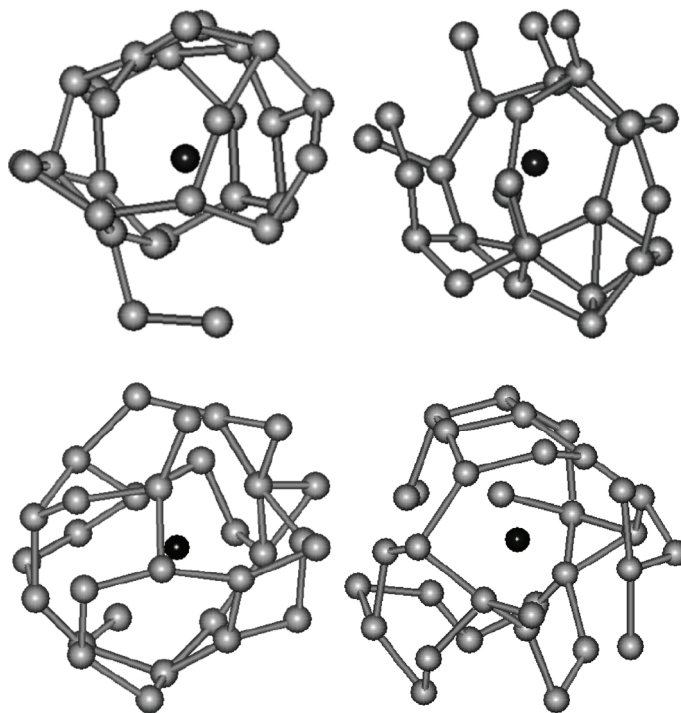


Рис. 13. Примеры окружения атомов аргона (черные шары) молекулами воды. Показаны атомы кислорода (серые шары) и водородные связи. Изображены молекулы воды, удаленные от аргона не более чем на 6,5 Å

ВЫВОДЫ

Итак, оказалось, что характер неоднородности аргона и воды, характеризуемый распределением объемов многогранников Вороного (распределением локальной плотности) очень похож. При окраске структур воды и аргона по объемам многогранников Вороного атомы аргона и молекулы воды со значениями ОМВ больше или меньше определенной величины образуют бесконечные ветвящиеся кластеры. Окружение атомов аргона, растворенных в воде, не очень похоже на их окружение в клатратных гидратах. Атомы аргона, внедренные в сетку водородных связей в воде, участвуют в согласованных движениях. Наблюдается ли согласованность в движениях атомов в жидком аргоне, в том числе долговременные корреляции в движении даже достаточно удаленных друг от друга частиц, найденные нами в жидкой воде [15, 29, 30], покажет будущее.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 12-03-00119-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Fisenko A.I., Malomuzh N.P., Oleynik A.V.* // Chem. Phys. Lett. – 2008. – **450**. – P. 297 – 301.
2. *Villard P.* // C.R. Acad. Sci. – 1896. – **123**. – P. 377.
3. *Davidson D.W., Handa Y.P., Ratcliff C.I. et al.* // Nature. – 1984. – **311**. – P. 142 – 143.
4. *Davidson D.W., Handa Y.P., Ratcliff C.I. et al.* // J. Incl. Phen. – 1984. – **2**. – P. 231.
5. *Маленков Г.Г., Аверкиев А.А., Бобровиц-Сарга Л. и др.* // Кристаллография. – 1999. – **44**, № 1. – С. 67 – 73.
6. *Malenkov G.G., Zheligovskaya E.A.* // J. Inclus. Phenom. Macrocyclic Chem. – 2004. – **48**, N 1. – P. 45 – 54.
7. *Manakov Yu.A., Voronin V.I., Kurnosov V.A. et al.* // J. Inc. Phen. Macrocyclic Chem. – 2004. – **48**, N 1. – P. 11 – 18.
8. *Манаков А.Ю., Дядин Ю.А.* // Рос. хим. журн. (Журн. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева). – 2003. – **XLVII**, № 3. – С. 28 – 42.
9. *Stackelberg M. von, Mülltr H.R.* // Naturwiss. – 1949. – **36**. – P. 327.
10. *Claussen W.F., Polgles M.F.* // J. Amer. Chem. Soc. – 1952. – **74**. – P. 4817 – 4819.
11. *Glew D.N.* // J. Chem. Phys. – 1962. – **66**. – P. – 605 – 609.
12. *Маленков Г.Г.* // Журн. структур. химии. – 1966. – **7**, № 3. – С. 31 – 36.
13. *Маленков Г.Г., Наберухин Ю.И., Волошин В.П.* // Рос. хим. журн. (Журн. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева). – 2009. – **LIII**, № 6. – С. 25 – 32.
14. *Malenkov G.G.* // Colloid and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2011. – **383**. – P. 41 – 47.
15. *Маленков Г.Г., Наберухин Ю.И., Волошин В.П.* // Журн. физ. химии. – 2012. – **86**, № 9. – С. 1485 – 1492.
16. *Rahman A.* // Phys. Rev. – 1964. – **136A**. – P. 405 – 411.
17. *Vogt P.S., Liapin R., Kirchner B.* // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2001. – **3**. – P. 1297 – 1302.
18. *Gohard E.K., Abbaspour M.* // J. Theory and Comput. – 2006. – **2**. – P. – 920 – 924.
19. *Swope W.C., Andersen H.C.* // J. Phys. Chem. – 1984. – **88**. – P. 6548 – 6556.
20. *Straatmaa T.P., Berendsen H.J.C., Postma J.P.M.* // J. Phys. Chem. – 1986. – **85**. – P. 672—6727.
21. *Бушув Ю.Г.* // Журн. общей химии. – 1994. – **64**. – С. 1931 – 1934.
22. *Crawford R.K., Daniels W.B.J.* // J. Chem. Phys. – 1969. – **50**. – P. 3171.
23. *Poltev V.I., Gokhlina T.A., Malenkov G.G.* // J. Biomolec. Struct. Dynam. – 1984. – **2**, N 2. – P. 421 – 429.
24. *Каплан И.Г.* Введение в межмолекулярные взаимодействия. – М.: Наука, 1982.
25. *Hodges M.P., Wheatley R.J., Harvey A.H.* // J. Chem. Phys. – 2002. – **117**. – P. 7169 – 7179.
26. *Маленков Г.Г.* // Журн. структур. химии. – 2006. – **47**, Прилож. – С. S5 – S35.
27. *Malenkov G.* // J. Phys. Condensed Matter. – 2009. – **21**, No 28. – P. 283101 – 283136.
28. *Маленков Г.Г.* // Журн. структур. химии. – 2007. – **48**, № 4. – С. 772 – 777.
29. *Holz M., Heil S.R., Sacco H.-D.* // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2000. – **258**. – P. 291 – 305.
30. *Malenkov G.G., Naberukhin Yu.I., Voloshin V.P.* // Struct. Chem. – 2011. – **22**, Issue 2. – P. 459 – 463.
31. *Волошин И.П., Маленков Г.Г., Наберухин Ю.И.* // Журн. структур. химии. – 2013. – **54**, Прилож. – С. S239 – S257.