

УДК: 544.2

## Моделирование свойств жидких гептана и циклогексана

Д. В. Зленко<sup>1,а</sup>, С. В. Стовбун<sup>2</sup>

<sup>1</sup>МГУ имени М. В. Ломоносова, биологический факультет,  
Россия, 119991, г. Москва, Воробьевы горы, 1/12.

<sup>2</sup>Институт химической физики РАН,  
Россия, 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4

E-mail: <sup>а</sup> dvzlenko@gmail.com

Получено 17 октября 2013 г.,  
после доработки 12 декабря 2013 г.

Построены модели жидкого гептана и циклогексана, макроскопические свойства которых соответствуют таковым реальных растворителей. Спектры рассеяния рентгеновского излучения модельных систем также хорошо соотносятся с экспериментальными спектрами. Анализ радиальных функций распределения позволило установить принципиальную особенность молекулярного строения жидкого циклогексана. Изометричные молекулы циклогексана упакованы более плотно и упорядоченно. Более того, плотная упаковка приводит к дефициту свободного объема, что объясняет повышенную вязкость и температуру плавления циклогексана.

Ключевые слова: циклогексан, молекулярное моделирование, газокристалл, радиальная функция распределения

### Liquid Heptane and Cyclohexane Properties Modeling

D. V. Zlenko<sup>1</sup>, S. V. Stovbun<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Lomonosov Moscow State University, 1/12 Vorobevy Gogy, Moscow, 119991, Russia

<sup>2</sup>Institute of Chemical Physics RAS, 4 Kosygina st., Moscow, 119991, Russia

**Abstract.** — The models of liquid heptane and cyclohexane has been developed. The properties of model liquids appear to be in a good agreement with a properties of real liquids. X-Ray diffraction spectra of model liquids were also in a good agreement with experimental ones. Radial distribution functions analysis allows us to reveal a crucial molecular feature of cyclohexane. Isometric molecules of cyclohexane are packed more tightly and regular. Tight packing lead to the free volume deficiency, which could explain increased viscosity and melting temperature of cyclohexane.

Keywords: cyclohexane, molecular modeling, gas-like crystal, radial distribution function

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 5, no. 5, pp. 813–820 (Russian).

## Введение

Хорошо известен феномен образования гелей в растворах низкомолекулярных хиральных веществ [Terech, Weiss, 1997]. В основном гелеобразование связано с агрегацией молекул при концентрациях порядка перколяционного порога (10–20 %) и выше. В этих условиях молекулы растворенного вещества в среднем располагаются достаточно близко для того, чтобы взаимодействуя образовать непрерывный кластер. Именно появление непрерывных трехмерных сетей, образованных агрегированными молекулами гелаторов, и приводит к резкому скачку вязкости и гелированию раствора.

Однако это не единственный наблюдаемый экспериментально сценарий. В низкоконцентрированных ( $10^{-2}$  М и меньше) гомохиральных растворах N-трифторацетилованных  $\alpha$ -аминоспиртов (ТФААС) наблюдается образование протяженных, квазиодномерных струн [Стовбун и др., 2012а]. Длина этих объектов может составлять сотни микрон при толщине в десятки или сотни нанометров. Оптическая и атомно-силовая микроскопия позволили установить, что струны являются уединенными объектами, которые приводят к гелированию, то есть резкому повышению вязкости раствора при концентрациях на 2–3 порядка ниже перколяционного порога [Стовбун и др., 2012а].

Этот феномен определяет теоретический и практический интерес к струнам и молекулам ТФААС. В самом деле, поскольку концентрация гелатора очень мала, образование струн представляет собой процесс спонтанной самоорганизации, возникновения структур из гомогенного раствора. Этот феномен наблюдается в предельно простой бинарной системе и управляется температурой, что существенно облегчает его исследование. В то же время какие-то процессы спонтанного формообразования на молекулярном уровне очевидно лежали в основе образования биополимеров на заре эволюции [Твердислов, 2013]. Действительно, ведь образование линейной цепочки ковалентно связанных мономерных звеньев, как, например, в белках или нуклеиновых кислотах, по сравнению со струной требует одного важного дополнительного этапа — этапа образования ковалентных связей. Можно предположить, что изначально цепочка не была ковалентно связанной, а мономеры удерживались вместе за счет иных сил. Это предположение звучало бы абсурдно, если бы не экспериментально наблюдаемый в растворах ТФААС феномен образования уединенных струн [Стовбун и др., 2012а].

Описываемые струны обладают выраженной и достаточно стабильной структурой, так как спектры рассеяния рентгеновского излучения их ксерогелями не зависят от того, в каком растворителе они были получены [Stovbun et al., 2013]. Это свидетельствует о высокой однородности и неслучайности их структуры. Там не менее, микроскопические исследования позволяют выявить различия в структуре растворов, окружающих струну в растворителях с разными физико-геометрическими параметрами. Струны, полученные в циклогексане, совершенно изолированы и окружены прозрачным, чистым раствором. Напротив, струны, образовавшиеся в несколько более полярном, а также менее изометрическом гептане, окружены достаточно толстым слоем мезофазы, оптически более плотной, по-видимому, обогащенной ТФААС и потому структурированной [Stovbun et al., 2013; Стовбун и др., 2012b]. Также экспериментально были выявлены различия в структурной макрокинетике образования струн в этих же растворителях. Так, в циклогексане струна формируется в виде цилиндра макроскопического, порядка микрон, диаметра, в то время как в гептане струна представлена обратным конусом субмикроскопических струн, объединяющихся в точке сборки в цилиндр по мере роста «толстой» струны [Стовбун и др., 2012b].

Наблюдаемые различия, возможно, связаны с глубокими различиями в структуре жидких гептана и циклогексана. Основное различие между этими молекулами заключается в их форме, а также в более высокой симметрии молекулы циклогексана. Последняя может находиться всего в двух устойчивых конформациях. В конформации «кресло» принадлежит к группе симметрии  $D_{3d}$  средней категории, а в конформации «ванна» к группе  $C_{2v}$  низшей категории. Молекула гептана при этом куда более подвижна и формально может существовать в 81 конформации. Из

них пара соответствует молекуле циклогексана в конформации «кресло», но она не реализуется из-за сильно перекрывания 1 и 7 атомов углерода молекулы. Среди оставшихся 44 конформаций 3 относятся к группе  $C_s$  и 7 к группе  $C_{2v}$  нижней категории, а оставшиеся 34 несимметричны ( $C_1$ ). Вероятно, помимо формальной симметрии конформаций циклогексана значение имеет также достаточно быстрая интерконверсия, в следствие которой средняя форма молекулы оказывается еще ближе к сферической [Kuharski et al., 1988; Wilson, Chandler, 1990]. Высокая симметрия молекулы вкупе с изометричностью приводят к тому, что в твердом состоянии циклогексан образует так называемые «газокристаллы» [Жижин и др., 1978]. Это промежуточное состояние вещества, характеризующееся наличием обычной для кристаллов трансляционной упорядоченности, но которые не обладает вращательной упорядоченностью. По данным ИК КР спектроскопии в твердом циклогексане вращательные движения относительно поворотной оси симметрии третьего порядка остаются расторможенными вплоть до температуры 115 К, при том что температура плавления циклогексана достаточно высока и составляет 280 К.

Факт существенного влияния формы молекул на плотность ранее уже был отмечен, более того были смоделированы зависимости вязкости от плотности углеводородов [Rowly, Ely, 1992]. Вопрос о влиянии формы молекул на плотность также поднимался в работе, посвященной молекулярным причинам превышения плотности циклогексана над плотностью 2,3-диметилбутана [Аникеенко, Медведев, 2011]. Авторы пришли к выводу, что сводить различия только к форме молекул или энергии их взаимодействия нельзя. Существенными оказываются оба фактора, а ключевую роль авторы отводят размеру молекул. Авторы предполагают, что размерные характеристики молекулы циклогексана позволяют ему более плотно упаковываться, не привлекая соображений симметрии. Отметим, что в эту концепцию плохо вписывается более крупный, но линейный и в целом несимметричный гептан. Поэтому, вероятно, важны все три фактора, а в рассматриваемом примере именно форма и симметрия молекул. Это связано с тем, что размеры, как и параметры дисперсионных взаимодействий для молекул гептана и циклогексана отличаются слабо, а форма и симметрия — сильно.

Моделированию углеводородов посвящено достаточно мало работ. Это связано прежде всего с низким интересом, мирового научного сообщества к столь просто устроенным системам. Тем не менее подобные работы существуют и для циклогексана, например, был смоделирован процесс его интерконверсии. Особо следует подчеркнуть, что авторы в значительной степени концентрируются на построении модели и особенностях динамики отдельных молекул, в значительной степени игнорируя свойства непрерывной фазы [Kuharski et al., 1988; Wilson, Chandler, 1990]. Большая же часть работ посвящена не непрерывным фазам чистых углеводородов, а их взаимодействию с какими-либо другими объектами. В этом случае внимания собственно углеводородам уделяют, как правило, мало.

Таким образом, сами по себе углеводороды оказываются далеко не просто устроенными и мало исследованными модельными методами объектами. Поэтому моделирование процессов агрегации молекул ТФААС в гептане и циклогексане, предшествующее образованию струн, требует дополнительных усилий по адекватному воспроизведению их свойств. Построению таких реалистичных моделей фрагментов непрерывной жидкой фазы гептана и циклогексана и посвящена настоящая работа.

## Методы

Модели молекул гептана и циклогексана были сконструированы на основании стандартных для силового поля OPLS [Jorgensen et al., 1996] типов атомов. Для концевых метильных групп гептана были использованы атомы типа `opls_135`, с парциальным зарядом  $-0.180$  в единицах заряда электрона. Атомы углерода метиленовых звеньев гептана и циклогексана моделировали при помощи стандартного `opls_136` с парциальным зарядом  $-0.120$ . Все атомы водорода моделировали при помощи стандартного для алканов типа `opls_140`, с парциальным зарядом

+0.060 [Jorgensen et al., 1996]. Никаких дополнительных корректировок жесткостей валентных и двугранных углов не проводили. Отметим, что полученные молекулы, несмотря на схожесть их молекулярных масс, обладают существенно различным пространственным строением (рис. 1), что хорошо согласуется со сделанными предположениями и фактом существования газокристаллов [Жижин и др., 1978]. Однако открытым остается вопрос о свойствах жидкого циклогексана.

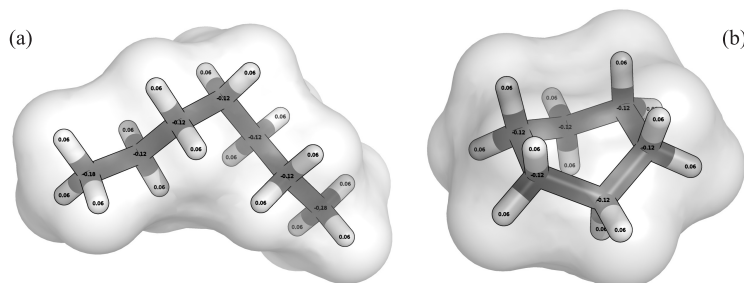


Рис. 1. Модели молекул гептана (а) и циклогексана (б). Показаны ковалентные связи внутри молекул, а также поверхность молекулы. Числа отражают парциальные заряды на атомах в соответствии с силовым полем OPLS [Jorgensen et al., 1996]

Для моделирования растворов гептана и циклогексана был использован пакет программ GROMACS [Pronk et al., 2013]. Уравнения движения были выбраны в форме Ланжевена, что позволяет избежать известных численных артефактов и хаотизировать траектории движения атомов. Все расчеты проведены в периодических граничных условиях с шагом интегрирования 1 фс. Для расчетов электростатических взаимодействий был использован метод PME [Essmann et al., 1995]. Для расчетов дисперсионных сил и попарных электростатических взаимодействий для близко расположенных атомов был использован радиус обрезания, равный 1.25 нм. Для поддержания постоянного давления в системе был использован алгоритм Берендсена [Berendsen et al., 1984], температура поддерживалась на уровне 300 К.

Для расчета дипольных моментов был использован пакет FireFly [Granovsky, <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>]. Квантово-химические расчеты проводились в рамках теории DFT, с функционалом B3LYP5 в стандартном базисе 6311 с одной дополнительной диффузной функцией, центрированной на атомах углерода. Частичные заряды групп атомов были вычислены как суммы парциальных зарядов соответствующих атомов по Лёвдину.

## Результаты

Как было отмечено выше, молекула циклогексана более симметрична и изометрична, чем молекула гептана (рис. 1). Кроме того, вследствие различий в форме молекул можно ожидать появления некоторого дипольного момента у молекулы гептана. Это связано с наличием разнесенных в пространстве парциальных зарядов атомов углерода и водорода концевых метильных групп. Квантово-химические расчеты показывают, что метильные группы на концах достаточно длинных углеводородных цепочек несут небольшой избыточный отрицательный заряд на уровне 0.05 от заряда электрона, что может привести к появлению общего дипольного момента у всей молекулы.

Расчеты показывают, что дипольный момент молекул рассматриваемых углеводородов в равновесных конформациях, показанных на рисунке 1, практически одинаков и составляет порядка 0.03 Д. При этом дипольный момент, рассчитанный методом молекулярной динамики для множества отличных от равновесной конформаций, оказывается выше и составляет 0.12 Д для циклогексана и 0.14 Д для гептана. При этом в справочниках для обеих молекул как правило указывают нулевой дипольный момент. Таким образом, принципиальных различий в электростатических свойствах рассматриваемых молекул не наблюдается. При этом следует отметить неточность в определении дипольного момента молекул в модели.

Конструирование непрерывной фазы жидкого растворителя является достаточно сложной операцией, включающей первоначальное размещение модельных молекул в пространстве и сопряженные с этим вносимые в систему возмущения. Мы не пытались сразу сконструировать равновесное начальное состояние, так как эта операция имеет очень большой вычислительный объем. В самом деле, взаимная подгонка молекул для их более плотной и равномерной упаковки, то есть создание состояния, изначально близкого к равновесному, по сути является задачей конформационного поиска. В системе, состоящей из нескольких тысяч молекул, каждая из которых может иметь несколько альтернативных конформаций, имеется очень большое число степеней свободы, перебрать которые за разумное время невозможно даже теоретически. Вспомним хотя бы парадокс Левинталя.

Альтернативный подход состоит в том, чтобы создать некоторое, пусть сильно неравновесное состояние, а затем средствами молекулярной динамики смоделировать его эволюцию к равновесному состоянию. В качестве начального было выбрано состояние в котором центры масс 8000 молекул гептана или циклогексана располагаются в узлах прямоугольной пространственной решетки, на расстоянии  $10 \text{ \AA}$  друг от друга. Это большое расстояние и средняя плотность собранной таким способом модельной системы составляла около 25 % от нормальной плотности жидкости.

Для компенсации разреженности на первом этапе был проведен расчет молекулярной динамики длиной в 1 нс при повышенном в 10 раз давлении. Эффективная объемная сжимаемость системы при этом оставалась неизменной и равной  $4.5 \cdot 10^{-5}$  обр. атм. В результате в течение 700–900 пс модельного времени средняя плотность системы пришла к более или менее нормальным для данного вещества значениям (рис. 2). По окончании расчета при повышенном давлении был проведен длинный (100 нс) релаксационный расчет молекулярной динамики, в ходе которого происходила релаксация возмущений, привнесенных неравновесным начальным состоянием.

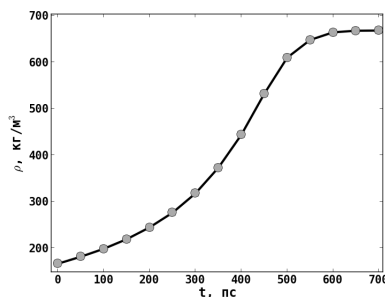


Рис. 2. Зависимость плотности гептана от модельного времени в ходе расчета, проведенного при повышенном давлении. Средняя плотность быстро приходит к значению, характерному для реального жидкого гептана ( $0.680 \text{ г/см}^3$ )

Вопрос о том, насколько удалось сгладить начальную неравновесность и насколько наблюдаемый набор микросостояний системы в конце релаксационного расчета отвечает реальному жидкому растворителю, представляет существенную проблему. Мы ориентировались прежде всего на плотность раствора, а также на доступные из литературы данные по широкоуголовому рассеянию рентгеновских лучей соответствующими жидкостями. Средняя плотность модельного циклогексана составила  $0.763 \pm 0.013 \text{ г/см}^3$  при экспериментальном значении  $0.779 \text{ г/см}^3$ . Плотность модельного гептана составила  $0.668 \pm 0.007 \text{ г/см}^3$  при плотности реального н-гептана  $0.680 \text{ г/см}^3$ . Таким образом плотность жидкостей несколько занижена, но находится в пределах формальных погрешностей расчета.

Спектры рассеяния рентгеновского излучения, рассчитанные для моделей, а также спектры, полученные экспериментально [Bochinski, Drozdowski, 1999; Katzoff, 1934] представлены на рисунке 3. Отметим, что представленные расчетные кривые были вычислены по последним

10 нс траекторий, то есть описывают конец траектории и более равновесное с нашей точки зрения состояние. Видно, что кривые очень хорошо соотносятся друг с другом. Это свидетельствует о хорошем соответствии между реальными растворителями и набором микросостояний, реализующихся в модельных системах под конец 100 нс расчета.

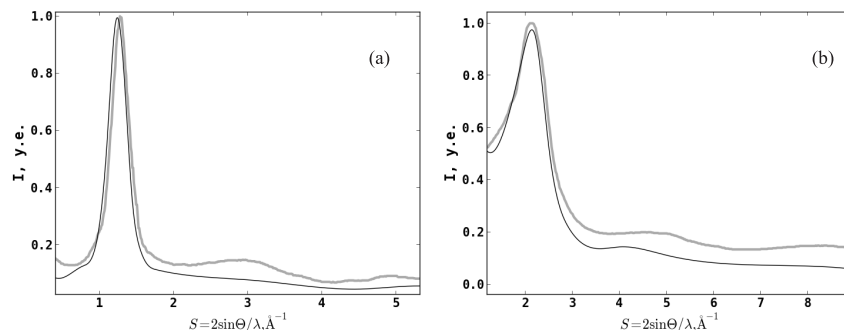


Рис. 3. Нормированные интенсивности рассеяния рентгеновского излучения ( $S = 2S \sin \Theta / \lambda$ ) циклогексаном (а) и н-гептаном (б). Серым показаны экспериментальные кривые [Katzoff, 1934; Bochinski, Drozdowski, 1999], черным — кривые, полученные в ходе МД расчетов

Рассмотрим радиальные функции распределения (РФР) для полученных систем. Радиальная функция распределения представляет собой отношение

$$g(r) = \frac{\rho(r)}{\rho_0},$$

где  $\rho(r)$  — средняя плотность атомов или иных частиц на расстоянии  $r$  от данного атома, а  $\rho_0$  — средняя объемная плотность тех частиц, для которых рассчитана РФР. Таким образом РФР позволяет установить, на каких расстояниях друг от друга в среднем располагаются, например, атомы в молекулах. Это наиболее общая и информативная среднестатистическая характеристика жидкой (нерегулярной) фазы. В самом деле, с точностью до нормировки Фурье спектр этой функции является функцией интенсивности рассеяния рентгеновского излучения ( $S = 2 \sin \Theta / \lambda$ ), показанной для рассматриваемых растворителей на рисунке 3.

Радиальные функции распределения, построенные для атомов молекул показаны на рисунке 4а. В этом случае для каждого атома молекулы были вычислены соответствующие нормированные плотности, генерируемые всеми остальными атомами. Соответственно, каждый наблюдаемый пик отвечает некоторому характерному межатомному расстоянию, часто попадающемуся в системе. Хорошо видно, что на малых расстояниях РФР циклогексана более выражена, да и первый широкий пик, соответствующий молекуле как целому расположен левее аналогичного пика в гептане. Это свидетельствует о более плотной упаковке молекул, что подтверждается также и данными о плотности растворителей. Плотность циклогексана ( $0.763 \text{ г/см}^3$ ) заметно выше плотности гептана ( $0.668 \text{ г/см}^3$ ).

Еще более показательны РФР, построенные для центров масс молекул (рис. 4б). Хорошо видно, что РФР циклогексана сильно осциллирует, не затухая до расстояний в  $25\text{--}30 \text{ \AA}$ . Такой вид РФР свидетельствует о плотной и крайне регулярной упаковке молекул, скорее характерной для кристаллоподобной структуры, а не для жидкости. Без труда можно различить пик, соответствующий пятому координационному слою. Наблюдаемую упаковку молекул циклогексана можно сравнить с упаковкой шаров, трением между которыми можно пренебречь. При этом между такими модельными шарами имеется некоторый свободный объем. Однако его доля значительно меньше свободного объема в обычной жидкости, который составляет порядка 15%. Это соответствует свободной молекулярной вакансии в первой координационной сфере, согласно модели строения жидкости, предложенной Френкелем [Френкель, 1975]. Наличие такой вакансии,

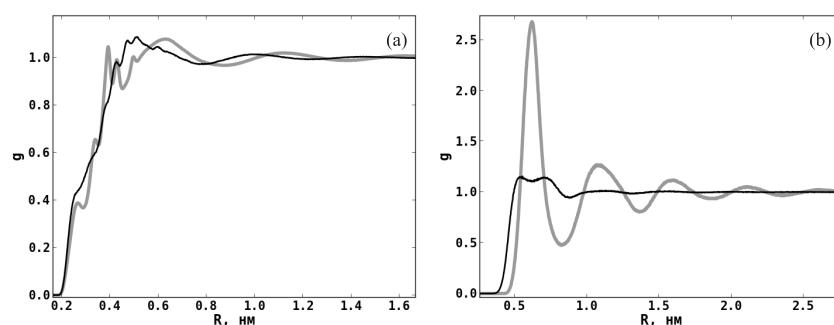


Рис. 4. Радиальные функции распределения, построенные для атомов (а) и центров масс молекул (б) для гептана (черная кривая) и циклогексана (серая кривая). Бросается в глаза высокая упорядоченность изодиаметрического циклогексана

случайно расположенной в каждой первой координационной сфере и имеющей объем, соизмеримый с объемом молекулы, определяет молекулярную подвижность и, соответственно, текучесть жидкости. Это приводит к быстрому затуханию РФР и появлению, таким образом, только одного выраженного пика. Данная концентрация вакансий соответствует перколяционному порогу и приводит к появлению бесконечного кластера вакансий [Клеман, Лаврентович, 2007]. В циклогексане в среднем объем вакансий набирается только на 3–4 координационной сфере, как легко видно из РФР. Действительно, с ростом расстояния между молекулами затухание осцилляций РФР, а, следовательно, и регулярность в упаковке молекул циклогексана нарушается и на расстояниях более 30 Å практически исчезает. При этом следует отметить, что обе жидкости, и гептан и циклогексан, формально соответствуют простой модели Френкеля, в которой доля свободного объема может варьировать.

Этот результат интересен сам по себе в отрыве от основной тематики настоящей работы. Отметим, что РФР углеводородов получены не впервые, но на отмеченную особенность авторы работы внимания не обратили [Аникеенко, Медведев, 2011], что связано с небольшим размером рассмотренной системы, а также с тем, что РФР циклогексана сравнивалась с РФР более или менее изометричного 2,3-диметилбутана.

Как было отмечено выше, циклогексан не образует настоящих кристаллов в полном смысле этого слова. Из-за высокой изометричности и симметрии молекул циклогексана даже при очень низких температурах (115 К) сохраняется вращательная подвижность циклогексана относительно оси, проходящей через центр кольца [Жижин и др., 1978]. И та же самая изометричность, которая приводит к разупорядочиванию твердой фазы, приводит к дополнительному структурированию жидкого циклогексана. Такая простая модель циклогексана как жидкости без вакансий, по-видимому, позволяет объяснить высокую температуру плавления циклогексана, 280 К по сравнению с гептаном, плавящимся при 180 К, и в два раза большую вязкость циклогексана, хотя их общих принципов физической химии должна наблюдаться обратная тенденция. Глубокие различия в жидких гептане и циклогексане, о которых свидетельствуют радиальные функции распределения, вероятно, лежат в основе различий в структурной кинетике образования струн в этих растворах. Этим же, скорее всего, объясняется наличие мезофазы в окрестностях струн, спонтанно образовавшихся в гептане и ее отсутствие в циклогексане. Тот факт, что в рамках молекулярно-динамических представлений удастся зафиксировать различия в структуре растворителей, позволяет предполагать, что удастся смоделировать и различия в агрегации молекул ТФААС в этих растворителях.

## Заключение

Построены и охарактеризованы модели непрерывных жидких гептана и циклогексана, хорошо соответствующие известным экспериментальным данным, что позволяет в дальнейшем ис-

пользовать их для моделирования агрегации молекул ТФААС. Показано, что между этими жидкостями существует принципиальное различие, связанное с более высокой симметрией молекул циклогексана ( $S_6$ ) и их изометричностью, что приводит к их более плотной и высокоупорядоченной упаковке. Так, на графиках радиальных функций распределения различимы пять пиков, отвечающих пяти координационным сферам, в пределах которых наблюдается упорядоченность. Это означает, что жидкий циклогексан сильно обеднен вакансиями, по сравнению с другими углеводородами, что приводит к росту его вязкости и температуры плавления.

## Список литературы

- Аникеенко А.В., Медведев Н.Н. О причине высокой плотности циклогексана // Журнал Структурной Химии. — 2011. — С. 513–519.
- Жижин Г.Н., Красюков Ю.Н., Мухтаров Э.И., Роговой В.Н. Анизотропия вращательных перориентаций циклогексана вблизи фазового перехода // Письма в ЖЭТФ. — 1978. — С. 465–468.
- Клеман М., Лаврентович О.Д. Основы физики частично упорядоченных сред. — Москва: Физматлит, 2007. — 679 с.
- Стовбун С.В., Занин А.М., Скоблин А.А. и др. Феноменологическое описание спонтанного образования макроскопических струн в низкоконцентрированных хиральных растворах и формирования анизометрических гелей // ДАН. — 2012а. — С. 645–648.
- Стовбун С.В., Занин А.М., Скоробогатько Д.С. и др. Хирооптические явления в слабых растворах гелаторов. // Хим. Физ. — 2012b. — С. 7–11.
- Твердислов В.А. Хиральность как первичный переключатель иерархических уровней в молекулярно-биологических системах // Биофизика. — 2013. — С. 159–164.
- Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. — Ленинград: Наука, 1975. — 592 с.
- Berendsen H., Postma J., van Gunsteren W. et al. Molecular dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys. — 1984. — P. 3684–3690.
- Bochinski Z., Drozdowski H. X-Ray Diffraction Investigation of Intermolecular Ordering in Liquid Benzene, Cyclohexane and n-Hexane. // Acta. Phys. Slovaca. — 1999. — P. 409–418.
- Essmann U., Perera L., Berkowitz M. et al. A smooth particle mesh Ewald method // J. Chem. Phys. — 1995. — P. 8577–8593.
- Granovsky A. Firefly version 8.0.0.  
<http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.
- Jorgensen W., Maxwell D., Tirado-Rives J. Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids // 7. J. Am. Chem. Soc. — 1996. — P. 11225–11236.
- Katzoff S. X-Ray Studies of the Molecular Arrangement in Liquids // J. Chem. Phys. — 1934. — P. 841–851.
- Kuharski R., Chandler D., Montgomery J. et al. Stochastic Molecular Dynamics Study of Cyclohexane Isomerization // J. Phys. Chem. — 1988. — P. 3261–3267.
- Pronk S., Pall S., Schulz R. et al. GROMACS 4.5: a high-throughput and highly parallel open source molecular simulation toolkit // Bioinformatics. — 2013. — P. 845–854.
- Rowly R., Ely J. Non-equilibrium molecular dynamics simulations of structured molecules. II. Isomeric effects on the viscosity of models for n-hexane, cyclohexane and benzene // Mol. Phys. — 1992. — P. 713–730.
- Stovbun S., Zanin A., Skoblin A. et al. Compaction of Intermolecular Bonds in the Macroscopic Chiral Phase of Strings // Rus. J. Phys. Chem. B. — 2013. — P. 1–7.
- Terech P., Weiss R. Low Molecular Mass Gelators of Organic Liquids and the Properties of Their Gels // Chem. Rev. — 1997. — P. 3133–3160.
- Wilson M., Chandler D. Molecular dynamics study of cyclohexane interconversion // Chem. Phys. — 1990. — P. 11–20.