

P12-2009-54

Х. Т. Холмуродов^{1, 2, *}, А. С. Чулкова², Н. А. Шастова²,
О. Н. Медведкина²

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ МОЛЕКУЛЫ БИФЕНИЛА
В РАСТВОРЕ АКТИВНОЙ СРЕДЫ

Направлено в «Журнал физической химии»

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

²Международный университет природы, общества и человека «Дубна»,
Дубна

*E-mail: mirzo@jinr.ru

Холмуродов Х. Т. и др.

P12-2009-54

Молекулярно-динамическое моделирование фазовых превращений молекулы бифенила в растворе активной среды

Целью настоящей работы является изучение влияния эффектов кулоновских взаимодействий на динамические свойства бифенила в растворе активной среды. Проведен анализ молекулярной динамики (МД) фазовых превращений молекулы бифенила в растворе азотной кислоты HNO_3 . Исследовались температурно-энергетические характеристики и фазовые превращения молекулы бифенила, взаимодействующей с раствором HNO_3 . Динамика плотностно-температурного распределения и структурных изменений молекулы бифенила прослежена в реальном времени. Построены зависимости функции радиального распределения и идентифицированы нетривиальные фазы в системе бифенил — активная среда.

Работа выполнена в Лаборатории радиационной биологии ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2009

Kholmurodov Kh. T. et al.

P12-2009-54

Molecular Dynamics Simulations of Phase Transitions of Biphenyl Molecule in an Active Solvent Medium

The aim of the present work was to study the influence of the effect of Coulomb interactions on the dynamical behavior of biphenyl in an active solvent medium. The analysis of the molecular dynamics (MD) of biphenyl molecules in the HNO_3 solution has been performed. The temperature-energetic characteristics and phase transformations of biphenyl interacting with HNO_3 solution were studied. The dynamics of density–temperature distribution of biphenyl molecule has been traced up in real time. The radial distribution functions were built up and nontrivial phases in the system of biphenyl–active solvent were identified.

The investigation has been performed at the Laboratory of Radiation Biology, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2009

ВВЕДЕНИЕ

Исследование физических и химических свойств молекулы бифенила ведется в последнее время со значительным интересом и весьма активно, причем как для изучения влияния данного соединения на окружающую среду, так и с точки зрения важности его во многих химико-биологических процессах [1–3]. Бифенилы, наряду с диоксинами (2,3,7,8-тетрахлордибензо[b,e]-1,4-диоксин), монооксидов углерода (CO) и азота (NO), дихлоро-дифенил-трихлоро-этаном (так называемой DDT dichloro-diphenyl-trichloro-ethane) и т. п., входят в состав тех основных химических компонентов и активных реагентов, которые составляют основу выбросов и загрязнений окружающей среды. Диоксины и бифенилы, к примеру, способны связываться с почвенными минералами и эффективно влиять на структуру и свойства почвы [4–6].

Бифенил (фенилбензол, дифенил) — химическая формула $(C_6H_5)_2$, молекулярная масса 154,20 а. е. м., бесцветные кристаллы с температурой плавления 70,5 °С и температурой кипения 254–255 °С — легко растворим в спирте, эфире, бензоле и многих других органических растворителях, нерастворим в воде. Молекула бифенила обладает свободным вращением вокруг центральной связи; бензольные кольца копланарны в кристаллах, но наклонены друг к другу в растворах.

При изучении свойств биомакромолекул или биологических процессов, протекающих с участием молекулы бифенила, исключительно важными являются вопросы образования разнообразных химических связей; молекула бифенила способна участвовать во многих межмолекулярных взаимодействиях, образовывать при этом все виды связей — ковалентные, ионные, водородные и ван-дер-ваальсовы.

Одними из самых современных подходов в исследовании динамических и структурных свойств бифенила, в комплексе с растворами и ионными соединениями, являются методы молекулярной динамики (МД) [2, 6]. Моделирование детальных структурных изменений бифенила, его микроскопического поведения и фазовых превращений обеспечивает ценную для науки и окружающей среды, промышленности химических материалов или химической биологии информацию [2, 3]. Молекула бифенила исследовалась для целей фармакологии и доставки лекарств [4], хроматографии [1–3], построения мо-

делей катализа ферментов и пространственной укладки структуры протеинов (protein folding) [7,8] и т. д.

В данной работе посредством МД-моделирования исследовались температурно-энергетические характеристики и фазовые превращения молекулы бифенила, взаимодействующего с раствором азотной кислоты HNO_3 . Известно, что HNO_3 — сильная кислота и ее соли — нитраты — получают действием HNO_3 на металлы, оксиды, гидроксиды или карбонаты [9]. Все нитраты хорошо растворимы в воде, и их растворы обладают незначительными окислительными свойствами. Применительно к молекуле бифенила в ряде работ были показаны особенности реакции нитрования с участием некоторых ароматических соединений, имеющих карбонильные группы [10–12]. При этом особо важно подчеркнуть, что нитрование бифенилкарбоновых кислот проходит через переходное состояние, на энергию которого значительное влияние оказывает кулоновское взаимодействие между карбоксильной группой и катионом нитрония. Причем сила взаимодействия и его характер (притяжение или отталкивание) зависят от строения бифенилкарбоновой кислоты [11–12]. Целью настоящей работы является изучение влияния эффектов кулоновских взаимодействий на динамические свойства бифенила в растворе HNO_3 . При этом обнаружены и идентифицированы нетривиальные фазовые превращения молекулы бифенила, подвергнутой различным режимам взаимодействия с раствором HNO_3 . Динамика плотностно-температурных распределений молекулы бифенила построена и прослежена в реальном времени.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Для МД-моделирования использовали программный пакет DL_POLY, разработанный группой молекулярного моделирования в Лаборатории Даресбари, Англия, при поддержке Исследовательского совета инженерных и физических наук для моделирования конденсированных фаз (проект ССР5). Код DL_POLY представляет собой программный пакет многоцелевого назначения для МД-расчетов; его авторами являются У. Смит, Т. Р. Форестер и И. Т. Тодоров [13, 14]. Мы использовали версию 2.19 кода DL_POLY, а начальная геометрия комплекса молекул бифенила задана согласно конфигурациям из базы данных пакета (http://www.cse.scitech.ac.uk/ccg/software/DL_POLY/).

Начальная конфигурация молекулярной системы бифенил + раствор приведена на рис. 1. При этом применяются периодические граничные условия по всем пространственным направлениям. Начальная конфигурация исходной системы была построена с помощью встроенного интерфейса пакета DL_POLY, содержащего множество утилит для визуализации и анализа результатов.

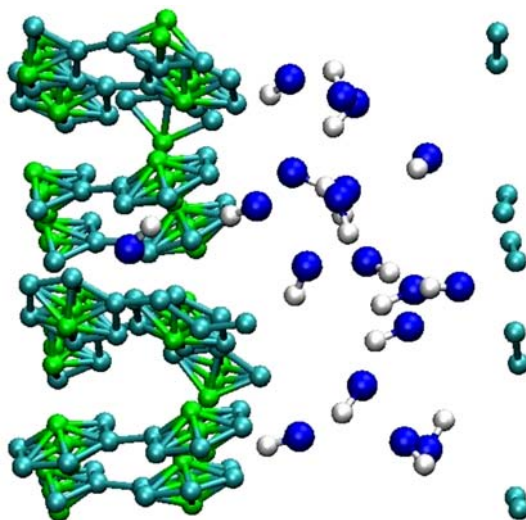


Рис. 1. Начальная конфигурация молекул бифенила в растворе кислоты

Конфигурационная энергия молекулярной модели представляется как сумма внутримолекулярной валентной энергии $E_{\text{вал}}$ и энергии невалентных взаимодействий $E_{\text{нв}}$:

$$E = E_{\text{вал}} + E_{\text{нв}}. \quad (1)$$

Энергия валентных взаимодействий $E_{\text{вал}}$ при этом задается соотношением

$$E_{\text{вал}} = E_{\text{вмс}} + E_{\text{угл}} + E_{\text{торс}} + E_{\text{инв}}, \quad (2)$$

где $E_{\text{вмс}}$ — энергия внутримолекулярной связи, $E_{\text{угл}}$ — энергия угловой связи, $E_{\text{торс}}$ — торсионная энергия и $E_{\text{инв}}$ — инверсионная энергия.

Энергия невалентных взаимодействий состоит из вандерваальсовой (ВДВ), электростатической и энергии водородных связей:

$$E_{\text{нв}} = E_{\text{вдв}} + E_{\text{эл}} + E_{\text{вс}}. \quad (3)$$

В молекуле бифенила каждое фенильное кольцо представляло собой жесткое тело; при расчетах моделировались восемь молекул бифенила с числом частиц, равным 144. В центре каждого фенильного кольца имеется три безмассовых зарядовых сайта, обеспечивающих квадрупольный момент кольца (см. рис. 2, а, б).

Активный раствор состоит из комплекса частиц HNO_3 , представленных в виде двухатомных молекул (рис. 2, в), с равным и противоположным по знаку

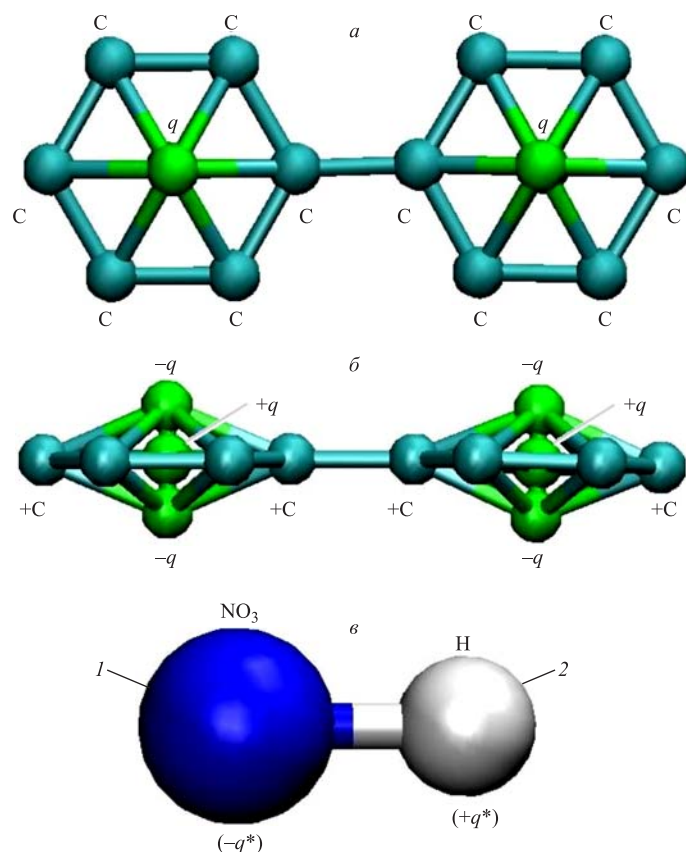


Рис. 2. Конфигурация молекулы бифенила (вид сбоку — *a* и сверху — *б*). Показаны два ароматических кольца из атомов углерода C с зарядовым сайтом q в центре. В центре каждого фенильного кольца имеются по три безмассовых заряда q . *в*) Конфигурация молекулы раствора, окружающего молекулу бифенила. 1 — отрицательный сайт NO_3 , 2 — атом H

зарядом каждого сайта $q^* = qe$, где e — единица заряда (заряд протона). Зарядовое число раствора q при МД-моделировании варьировалось в интервале от $q = 0$ до 1 с шагом 0,01 (см. табл. 1).

В табл. 1 приведены значения массы и заряда частиц, используемых в МД-моделировании. Здесь $m_e = 1,66 \cdot 10^{-27}$ кг — атомная единица массы (а. е. м.), $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл — заряд протона.

В МД-моделировании были использованы потенциалы трех видов, описывающие силовое поле молекулы бифенила в активном растворе:

Таблица 1. Значения массы и заряда частиц в системе бифенил–раствор

Атом	Массовое число (m_e , а.е.м.)	Зарядовое число q (заряд протона e)
C	13,02	0,15
q	0.	-2,253
q	0.	+3,606
NO ₃	62,005	0, - 0,01, - 0,02, - 0,03, ..., - 1
H	1,008	0, + 0,01, + 0,02, + 0,03, ..., + 1

- потенциал степенного ряда (nm);
- потенциал Бакингема (buck);
- потенциал Леннарда–Джонса (lj).

Параметры взаимодействия и функциональные формы потенциалов приведены в табл. 2–4:

Таблица 2. Функциональная форма и параметры потенциала для атомной пары C–q

Атомная пара	Потенциал	Функциональная форма	Параметры	E_0 , кДж/моль	n	m	r_0 Å
C–q	nm	$U(r) = \frac{E_0}{(n-m)} \times \left[m \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - n \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right]$	E_0, n, m, r_0	0,2	12,0	6,0	3,37

Компьютерное МД-моделирование включало в себя три последующих этапа. На первом этапе осуществляли ММ (молекулярно-механическое) вычисление минимума энергии бифенила с окружающим раствором при $T = 0,1$ К. В данном случае была выбрана ячейка объемом $V = (13,68 \text{ Å})^3$, количество молекул бифенила $N = 8$ (144 атома), количество молекул раствора HNO₃ равно $N = 18$ (36 атомов). Второй этап моделирования — медленное нагревание системы с минимальным значением энергии от состояния при $T = 0,1$ К до $T = 250$ К. Непосредственно сам процесс МД-вычисления начинается по-

Таблица 3. Функциональная форма и параметры потенциала для атомной пары C–C

Атомная пара	Потенциал	Функциональная форма	Параметры	A , кДж/моль	ρ , Å	C , Å ⁶
C–C	buck	$U(r) = A \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right) - \frac{C}{r^6}$	A, ρ, C	369743,0	0,28	2576,2

Таблица 4. Функциональная форма и параметры потенциала для C–NO₃ и NO₃–NO₃

Атомная пара	Потенциал	Функциональная форма	Параметры	ε , кДж/моль	σ , Å
C–NO ₃	lj	$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$	ε, σ	0,41838	3,14
NO ₃ –NO ₃	lj	...	ε, σ	0,41115	2,93

сле доведения системы до энергетически минимизированных состояний при $T = 250$ К. Энергия системы сохраняется в течение всего процесса моделирования (от десяти до сотен тысяч шагов по времени) в микроканоническом ансамбле NVE. Уравнение движения решалось по схеме Верле с точностью кватернионов (quaternion) 10^{-5} . Шаг интегрирования ньютоновских уравнений движения равен 1 фс. Вычисление длин химических связей молекул проводилось на базе алгоритма Shake с точностью 10^{-8} . Использовались периодические граничные условия по всем трем координатным осям; электростатические взаимодействия при этом вычислялись по методу суммирования Эвалда с точностью 10^{-5} .

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Пороговый характер динамики температуры и полной энергии системы. Над релаксированными структурами молекул бифенила с раствором HNO₃ была выполнена серия МД-вычислений при разных значениях зарядового числа $q = -q(\text{NO}_3) = +q(\text{H}^+) = 0; 0,01; 0,02, \dots, 1$ в одинаковых условиях моделирования, описанных выше. Отметим, что значения зарядового числа q варьировались только для атомов раствора; для молекул

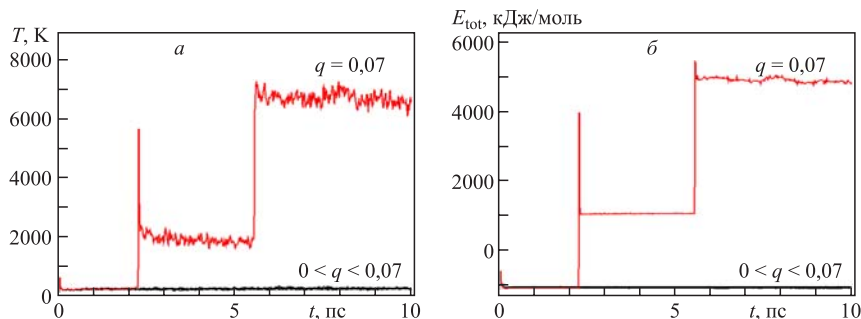


Рис. 3. Температура (а) и полная энергия (б) системы для различных значений зарядового числа молекул раствора

бифенила заряды имеют фиксированные значения, как показано в табл. 1. Результаты вычисления динамических изменений температуры и полной энергии системы приведены на рис. 3, а, б. Видно, что при всех значениях зарядового числа в интервале $0 < q < 0,07$ температура системы варьируется около заданного релаксированного значения $T = 250$ К; полная энергия при этом равна $E = -1090$ кДж/моль. При значениях зарядового числа $q = -q(\text{NO}_3^-) = +q(\text{H}^+) > 0,07$ происходит существенное изменение динамики температурно-энергетических характеристик системы, свидетельствующее о фазовых перестройках в системе. А именно, при $q > 0,07$ мы наблюдаем три разные области в значениях температуры и энергии системы (см. табл. 5):

1) при временах $0 < t < 2,2$ пс температура и энергия системы колеблются около релаксированных значений 250 К и -1090 кДж/моль соответственно;

2) в интервале времени $2,2 < t < 5,6$ пс происходит резкий скачок значений температуры до $T = 2000$ К; полная энергия при этом становится положительной и равной $E = 1050$ кДж/моль;

3) в интервале $5,6 < t < 10$ пс происходит второй скачок в значениях температуры до $T = 6700$ К и энергии до $E = 4900$ кДж/моль.

Таблица 5. Значения температуры и энергии системы бифенил–раствор при $q > 0,07$

	Область I ($0 < t < 2,2$ пс)	Область II ($2,2 < t < 5,6$ пс)	Область III ($5,6 < t < 10$ пс)
T , К	250	2000	6700
E (кДж/моль)	-1090	1050	4900

Динамика структурных конформационных изменений. Для иллюстрации структурных изменений молекулы бифенила и сравнения динамики системы при различных температурно-энергетических режимах, приведенных на рис. 4, *а, б*, ниже построены анимационные картины (snapshots), соответствующие значениям зарядового числа раствора $q = 0,05$ (*а*) и $0,07$ (*б*).

Из рис. 4, *а* видно, что при $q = 0,05$ молекулы бифенила сохраняют регулярную структуру (как в отдельности, так и в комплексе) в течение всего периода динамических изменений. В то же время на рис. 4, *б* при $q = 0,07$ мы наблюдаем разрушение регулярных конфигураций молекул бифенила, причем вначале — молекулярного комплекса, затем — самой целостной структуры молекулы. Данная картина соответствует тем резким динамическим изменениям (рис. 3), где дважды наблюдаются скачкообразные изменения температуры. При первом скачке температуры от релаксированного значения 250 К до 2000 К разрушается регулярная структура комплекса «бифенил»; при последующем скачке температуры от 2000 до 6700 К речь может идти лишь о разрушении химических связей, которые обеспечивает целостность самой молекулы.

Энергии невалентных (вандерваальсова и кулоновского) взаимодействий. Результаты вычисления динамических изменений энергии вандерваальсовского и кулоновского взаимодействий системы приведены на рис. 5, *а, б*.

Видно, что при всех значениях зарядового числа в интервале $0 < q < 0,07$ при значении температуры системы $T = 250$ К полная энергия вандерваальсова взаимодействия равна $E = -400$ кДж/моль, при этом энергия кулоновского взаимодействия колеблется в интервале от -1150 кДж/моль до -850 кДж/моль. При значениях зарядового числа $q = -q(\text{NO}_3^-) = +q(\text{H}^+) > 0,07$ мы наблюдаем три разные области в значениях температуры и энергии системы (см. табл. 6):

Таблица 6. Значения энергии вандерваальсова и кулоновского взаимодействий при $q > 0,07$

Значения энергии	Область I ($0 < t < 2,2$ пс)	Область II ($2,2 < t < 5,6$ пс)	Область III ($5,6 < t < 10$ пс)
T , К	250	2000	6700
$E_{\text{ВДВ}}$, кДж/моль	-400	0	200
$E_{\text{кул}}$, кДж/моль	-850	-650	-620

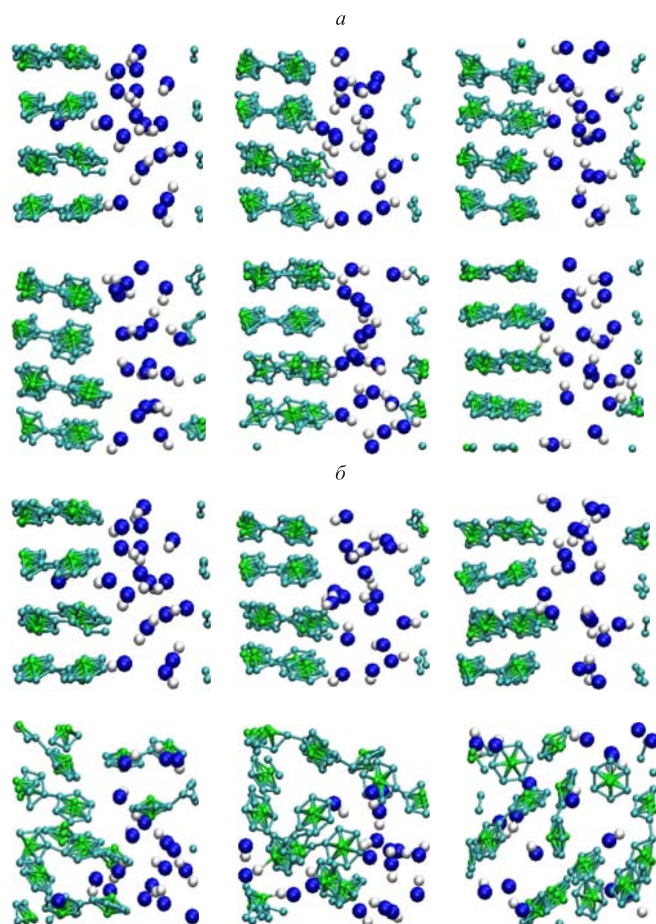


Рис. 4. Шесть последовательных конфигураций молекулы бифенила в растворе при $q = 0,05$ (*a*) и $q = 0,07$ (*б*). Конфигурации системы соответствуют временам $t = 0, 1, 2, 3, 5$ и 10 пс (вид слева направо и сверху вниз)

- при временах $0 < t < 2,2$ пс энергия вандерваальсова и кулоновского взаимодействий системы колеблется около релаксированных значений -400 и -850 кДж/моль соответственно;
- в интервале времени $2,2 < t < 5,6$ пс происходит скачок значений при температуре до $T = 2000$ К; энергии вандерваальсова и кулоновского взаимодействий при этом становятся равными 0 и -650 кДж/моль;

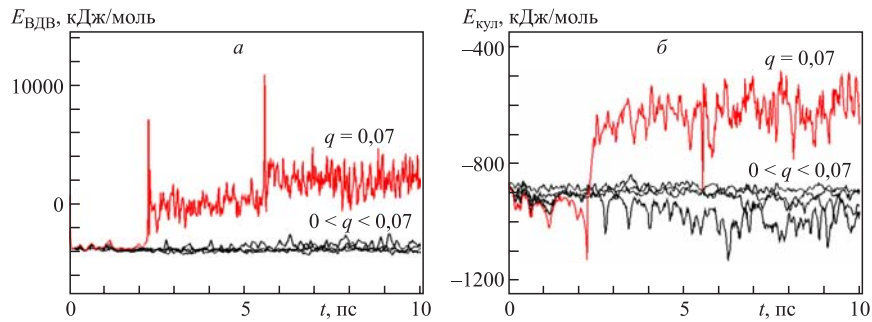


Рис. 5. Энергия вандерваальсовых (а) и кулоновских (б) взаимодействий для различных значений зарядового числа молекул раствора

- в интервале $5,6 < t < 10$ пс происходит второй скачок при значениях температуры до $T = 6700$ К и энергии становятся равными 200 и -620 кДж/моль соответственно.

Энергии валентных связей (угловые и дигедральные (торсионные) взаимодействия). Представлены результаты вычисления динамических изменений энергии валентных связей угловых и дигедральных (торсионных) взаимодействий системы, которые приведены на рис. 6, а, б. При всех значениях зарядового числа в интервале $0 < q < 0,07$ температура системы равна $T = 250$ К и полная энергия связей угловых взаимодействий колеблется в интервале от 0 до 40 кДж/моль; при этом энергия дигедральных взаимодействий равна $E = 20$ кДж/моль. При $q > 0,07$ мы наблюдаем три разные области значений температуры и энергии системы (см табл. 7):

- при временах $0 < t < 2,2$ пс энергия валентных связей угловых и

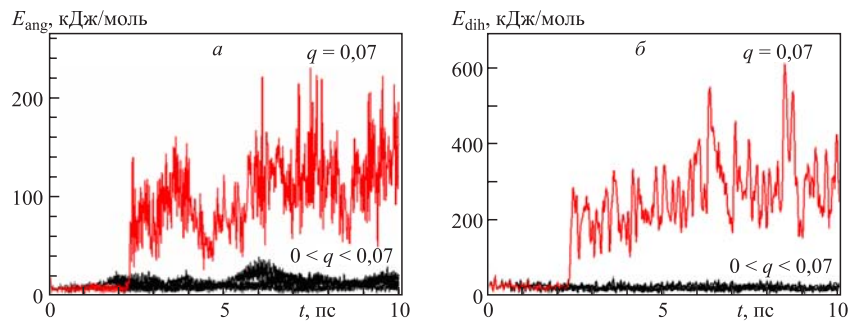


Рис. 6. Энергия угловых (а) и дигедральных торсионных (б) валентных связей для различных значений зарядового числа молекул раствора

дигедральных взаимодействий системы колеблется около релаксированных значений 10 и 20 кДж/моль соответственно;

- в интервале времени $2,2 < t < 5,6$ пс происходит резкий скачок значений при температуре до $T = 2000$ К; энергии валентных связей угловых и дигедральных взаимодействий системы при этом становятся равными 100 и 230 кДж/моль;

- в интервале $5,6 < t < 10$ пс происходит второй скачок при значениях температуры до $T = 6700$ К и энергии становятся равными 140 и 300 кДж/моль соответственно.

Таблица 7. Значения энергий валентных связей (угловых и дигедральных взаимодействий) при $q > 0,07$

Значения энергий	Область I ($0 < t < 2,2$ пс)	Область II ($2,2 < t < 5,6$ пс)	Область III ($5,6 < t < 10$ пс)
T , К	250	2000	6700
E_{ang} , кДж/моль	10	100	140
E_{dih} , кДж/моль	20	230	300

Диффузионные свойства. В табл. 8 представлены значения коэффициента диффузии для системы бифенил — активный раствор при соответствующих значениях зарядового числа раствора. Коэффициенты диффузии для наглядности представлены на рис. 7. С ростом зарядового числа наблюдается существенное увеличение значения коэффициентов диффузии как для раствора, так и бифенила. Эти данные коррелируют с температурно-энергетическими изменениями, приведенными выше, и указывают на фазовые превращения в системе бифенил — активный раствор.

Таблица 8. Параметры электронных колец, образующихся сразу за каспом

Молекула	$D(\cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с})$ ($q = 0$)	$D(\cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с})$ ($q = 0,05$)	$D(\cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с})$ ($q = 0,06$)	$D(\cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с})$ ($q = 0,07$)
Бифенил	$1,9655E - 01$	$4,4771E - 01$	$2,7546E - 01$	$2,0049E + 01$
HNO_3	$4,3292E + 00$	$4,4788E + 00$	$6,4789E + 00$	$5,8165E + 01$

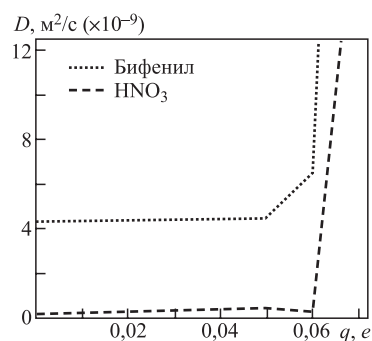


Рис. 7. График зависимости коэффициента диффузии от зарядового числа раствора

Из рис. 7 видно, что значение коэффициента диффузии остается примерно постоянным при изменении температуры от 250 до 2000 К, а при достижении температуры 6700 К происходит его резкий скачок. Рост диффузионных коэффициентов, безусловно, говорит о переходе вещества в другую фазу.

Функция радиального распределения. На рис. 8–11 представлены графики функций радиального распределения (ФРР) системы бифенил — активный раствор, вычисленных при различных значениях зарядовых чисел HNO_3 . ФРР определяет вероятность встретить атом того или иного сорта, находящийся на расстоянии $r + dr$ от данного атома; эта функция определяет вероятность количества ближайших соседей и расстояние до них. Следует отметить, что ФРР характеризует расположение атомов вокруг других соседних или дальних центров (атомов) и представляет собой один из основных параметров, указывающих на структурные перестройки в системе. Количество пиков ФРР имеет очень глубокий смысл и указывает на то, в каком состоянии (твердое тело, жидкость или газообразное) находится вещество.

На рис. 8, *a, б* приведены значения функции радиального распределения для бифенила *a)* $q-q$ и *б)* $\text{C}-\text{C}$. Видно, что с увеличением зарядового числа от 0 до 0,1 происходит уменьшение амплитуды ФРР; такое же поведение характерно и для атомов раствора, приведенных на рис. 9, *a, б*. В то же время на рис. 9, *б* видно, что ФРР для связи $\text{H}-\text{H}$ имеет максимум с ростом зарядового числа раствора, смещенный в сторону малых расстояний, что свидетельствует об усилении влияния данной связи на структуру соседних частиц.

На рис. 10 и 11 представлены графики ФРР для системы бифенил–раствор. Из рис. 10, *a, б* можно видеть четкую тенденцию роста амплитуды ФРР с увеличением зарядового числа раствора q . Наиболее характерное изменение значений ФРР с зарядовым числом раствора иллюстрирует рис. 11, *a* для связи

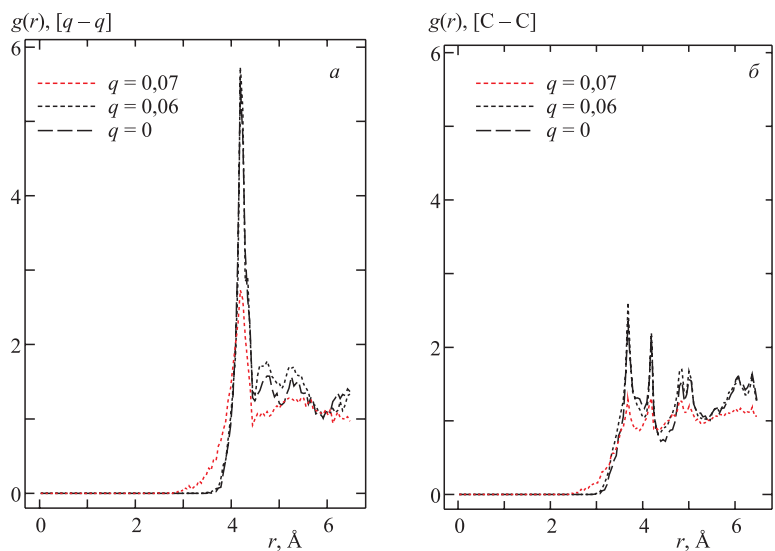


Рис. 8. График функции радиального распределения атомов бифенила а) $q-q$ и б) C-C

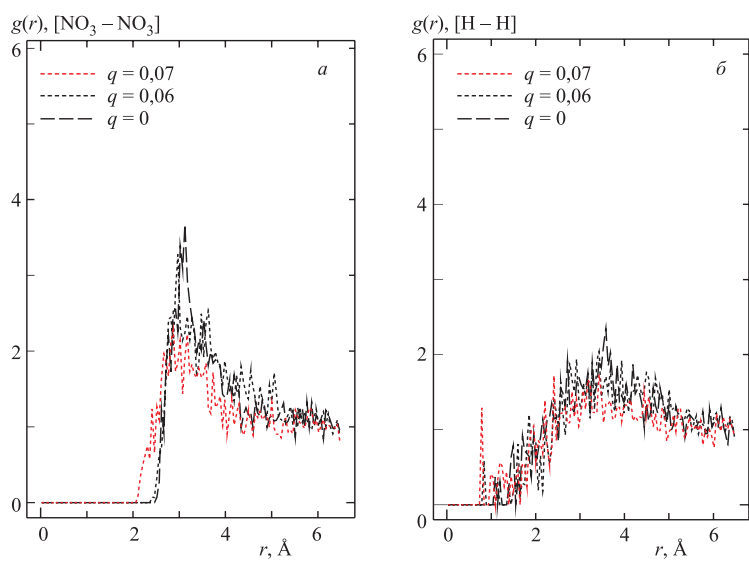


Рис. 9. График функции радиального распределения атомов раствора а) NO_3-NO_3 и б) H-H

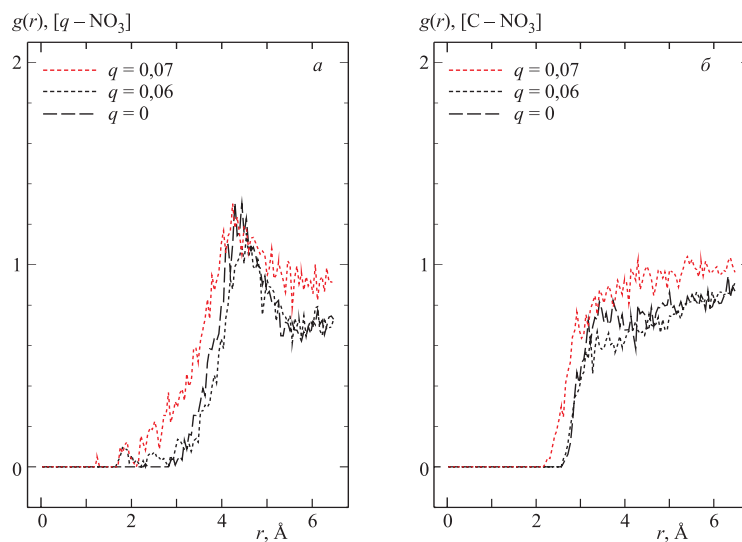


Рис. 10. График функции радиального распределения атомов бифенила–раствора а) $q-NO_3$ и б) $C-NO_3$

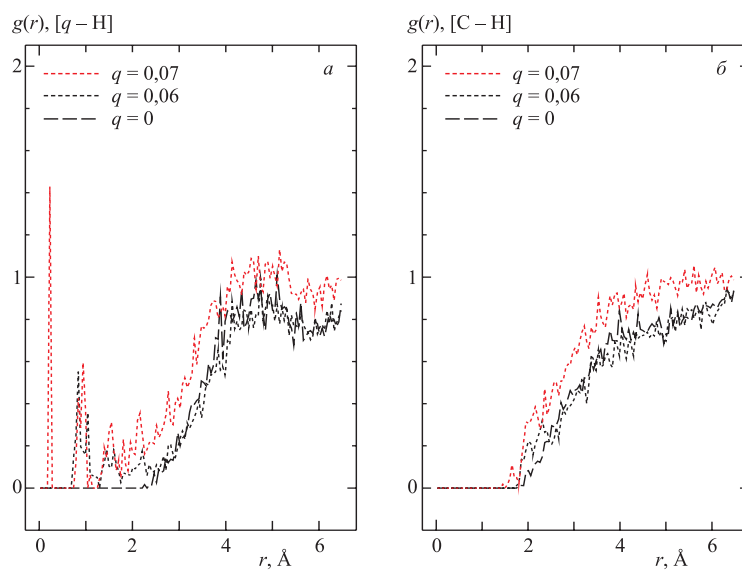


Рис. 11. График функции радиального распределения бифенила–раствора а) $q-H$ и б) $C-H$

q -Н. Хорошо видно, что увеличение амплитуды ФРП в области расстояний от 0 до 2 Å свидетельствует об образовании сильной связи между атомами q -Н. Эта сильная связь разрушает упорядоченную структуру бифенила, что приводит к образованию новых фаз.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Gener I., Ginestet G., Buntinx G., Bremard C.* Sorption of Biphenyl in NaX Zeolites // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2000. V. 2. P. 1855–1864.
2. *Salsbury F. R. Jr., Crowder M. W., Kingsmore S. F., Huntley J. J.* Molecular Dynamics Simulations of the Metallo-Beta-Lactamase from Bacteroids Fragilis in the Presence and Absence of a Tight-Binding Inhibitor // *J. Mol. Model.*, 2009. V. 15 (2). P. 133–145.
3. *Tigini V., Prigione V., Toro S. D., Fava F., Varese G. C.* Isolation and Characterisation of Polychlorinated Biphenyl (PCB) Degrading Fungi from a Historically Contaminated Soil // *Microbial Cell Factories*, 2009. V. 8. P. 5–12.
4. *Vasilyeva G. K., Strijakova E. R.* Bioremediation of Soil and Sediment Contaminated by Polychlorobiphenyls // *Microbiology*, 2007. V. 76. P. 639–653.
5. *Szejtli J.* Utilization of Cyclodextrins in Industrial Products and Process // *J. Mater. Chem.*, 1997. V. 7. P. 575.
6. *Manunza B., Deianna S., Pintore M., Gessa C.* Structure and Internal Motion of Solvated Beta-Cyclodextrin: Molecular Dynamics Study // *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, 1997. V. 419. P. 133.
7. *Saegner W., Jacob J., Steiner K., Hoffman D. et al.* Structures of the Common Cyclodextrins and Their Larger Analogues-Beyond the Doughnut // *Chem. Rev.*, 1998. V. 98. P. 1787.
8. *Caudle M. W., Richardson J. R., Delea K. C., Guillot T. S., Wang M., Pennell K. D., Miller G. W.* Уменьшение экспрессии переносчиков дофамина, индуцированное полихлорированным бифенилом, как предшественник токсичности дофамина, ассоциированной с болезнью Паркинсона // *Toxicol. Sci.* 2006. Т. 92, № 2, С. 490–499.
9. *Ахметов Н. С.* Общая и неорганическая химия, М.: Высшая школа, 2001.
10. *Strazzolini P., Verado G., Gorassini F., Giuanini G. A.* // *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 1995. V. 68. P. 1155.
11. *Колобов А. В., Русаков А. И., Соколов А. В., Кофанов Е. Р.* // *Известия вузов. Химия и химическая технология.* 1996. Т. 39, вып. 1–2. С. 44–49.
12. *Борисов П. В., Овчинников К. Л.* Эффект сопровождения (chaperon effect) в реакции нитрования двуядерных карбоновых кислот // *Материалы устных докладов XI школы-конференции по органической химии.* Екатеринбург, 2008. С. 31–35.
13. *Smith W., Forester, T.* // *J. Molec. Graphics*, 1996. V. 14, № 136, P. 3.
14. *Smith W, Forester T. R., Todorov I. T.* THE DL POLY 2 USER MANUAL, STFC Daresbury Laboratory Daresbury, Warrington WA4 4AD Cheshire, UK, Version 2.19, April 2008.

Получено 14 апреля 2009 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 19.08.2009.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,12. Уч.-изд. л. 1,35. Тираж 200 экз. Заказ № 56689.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/