

Структурные и диффузионные свойства дегидратированного двойного слоистого гидроксида алюминия и лития на основе метода молекулярной динамики¹⁾

В. Г. Лукьянчук^{+*2)}, А. В. Ланкин^{*+2)}, Г. Э. Норман^{×+*2)}

⁺Московский физико-технический институт (государственный университет), 141700 Долгопрудный, Россия

^{*}Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

[×]Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 августа 2023 г.

После переработки 20 сентября 2023 г.

Принята к публикации 26 сентября 2023 г.

Построена атомистическая модель дегидратированного хлорсодержащего двойного слоистого гидроксида алюминия и лития $\text{Li} \cdot \text{Al}_2(\text{OH})_6\text{Cl}$, ДГАЛ-Cl, перспективного вещества для сорбции лития из бедных рассолов. Найдены эффективные заряды атомов системы методом DDEC6 (Density Derived Electrostatic and Chemical approach). Проведен молекулярно-динамический анализ ДГАЛ-Cl на основе построенной модели. Рассчитаны структурные характеристики трех пар атомов в металлических слоях ДГАЛ-Cl и распределение плотности вероятности атомов в направлении перпендикулярном к этим слоям. Получена температурная зависимость коэффициента диффузии атомов лития в пространстве между металлическими слоями в диапазоне 325–450 К.

DOI: 10.31857/S1234567823200107, EDN: orlkr

1. Введение. Статья посвящена разработке атомистической модели дегидратированного $\text{Li} \cdot \text{Al}_2(\text{OH})_6\text{Cl}$ (ДГАЛ-Cl). Модель проверена по структурным и диффузионным свойствам.

Как показывают ранние исследования, использование ДГАЛ-Cl, относящегося к классу двойных слоистых гидроксидов, является перспективным методом добычи ключевого компонента современных аккумуляторов лития из бедных рассолов [1–4]. Показано, что ДГАЛ-Cl способен сорбировать до 91 % ионов лития из искусственного рассола с высокой селективностью по отношению к ионам Na и K [5–7]. К иным преимуществам можно отнести низкую стоимость производства и отсутствие токсичных выбросов.

Существенным недостатком, однако, является условная стабильность данного вещества, которая существенно зависит от концентрации LiCl в рассоле. Тем не менее, термодинамическая стабильность ДГАЛ-Cl может быть повышена путем допирования ионами Fe^{3+} [8], что говорит о возможности

дальнейшей структурной модификации с целью увеличения стабильности и эффективности сорбции.

Методы компьютерного моделирования могут пролить свет на процессы интерколяции ионов Li из раствора на атомарном уровне, тем самым дополняя экспериментальный подход в поиске возможных путей модификации кристаллической структуры.

Квантово-механические расчеты с применением метода функционала электронной плотности (DFT) успешно использовались для моделирования двойных слоистых гидроксидов [10, 11]. Однако метод молекулярной динамики, широко применяемый для многих задач [12–17], сталкивался с трудностями из-за отсутствия подходящего потенциала. Использование общепринятого силового поля ClayFF [18, 19] могло приводить к выбросу металлических ионов из слоев в межслоевое пространство, что разрушало структуру LDH [20, 21].

Реакционные силовые поля (ReaxFF [22, 23]), хотя и приближены по точности к DFT, не позволяют моделировать длительные атомарные процессы в ДГАЛ-Cl [24]. Также существует силовое поле LDHFF [25], которое хорошо описывает октаэдрическую структуру ламелей в течение длительного времени, но его сложность и явное задание неразрушимых связей ограничивают его применимость в широком классе задач.

¹⁾См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾e-mail: lukianchuk.vg@phystech.edu; alex198508@yandex.ru; norman@ihed.ras.ru

Таким образом, было решено выбрать ClayFF ввиду его популярности при моделировании глинистых веществ и простоты, которая дает широкие возможности для его модификации [26] под конкретный тип материалов, в том числе и двойных слоистых гидроксидов [27]. Количество молекул воды в элементарной ячейке ДГАЛ-С1 может существенно варьироваться, поэтому для простоты в данной работе рассматривается дегидратированный ДГАЛ-С1.

Настоящая работа посвящена созданию модели дегидратированного ДГАЛ-С1, а также расчету его структурных и диффузионных свойств. В пункте 2 приводится описание модели взаимодействия атомов, а также путь ее модификации, в пункте 3 описываются параметры моделирования. В пунктах 4 и 5 представлены результаты расчета структурных и диффузионных свойств, а также сравнение с экспериментами и расчетами других авторов.

2. Построение силового поля. Силовое поле ClayFF [18, 19] имеет вид:

$$E_{\text{total}} = E_{\text{Coulombic}} + E_{\text{VDW}} + E_{\text{bond stretch}} + E_{\text{angle bend}},$$

где

$$E_{\text{Coul}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}},$$

$$E_{\text{VDW}} = \sum_{i \neq j} D_{o,ij} \left[\left(\frac{R_{o,ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{o,ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right],$$

$$E_{\text{bond stretch}} = \sum_{\text{bonds}} k_1 (r_{ij} - r_0)^2,$$

$$E_{\text{angle bend}} = \sum_{\text{angles}} k_2 (\theta_{ijk} - \theta_0)^2.$$

Здесь r_{ij} – расстояние между частицами, E_{total} – полная энергия, представленная в виде суммы кулоновской $E_{\text{Coulombic}}$, ван-дер-ваальсовой E_{VDW} энергий с константами взаимодействия $D_{o,ij}$, $R_{o,ij}$ и эффективными электрическими зарядами q_i , q_j , а также гармонических энергий $E_{\text{bond stretch}}$ и $E_{\text{angle bend}}$ для жесткого определения ковалентной связи в гидроксильной группе ОН и угла изгиба М–О–Н (М – металлический ион) с константами k_1 , r_0 и k_2 , θ_0 соответственно.

Для пересчета эффективных зарядов был использован алгоритм DDEC6, реализованный в программном пакете Chgemo Program [28, 29]. В отличие от алгоритма DMol [30], использовавшегося при разработке оригинального ClayFF, DDEC6 более локален, что в случае некоторых веществ может существенно влиять на общее качество модели.

Для сравнения также были проведены расчеты эффективных зарядов более старым по сравнению с DDEC6 (2016 г.) методом Бадера (2009 г.) [31] (см. табл. 1) – заряды существенно отличаются как от ClayFF, так и DDEC6 для всех атомов, кроме Li. Кроме того, заряд кислорода получился почти в 2 раза больше, чем у популярных трехточечных моделей воды TIP3P, SPC и SPC/E [32]. Хотя молекулярно-динамическая модель на бадеровских зарядах и продемонстрировала стабильность структуры в течение нескольких наносекунд моделирования, было решено сосредоточиться на параметризации DDEC6 ввиду преимущества в эффективных зарядах с ClayFF для атомов Al, O и H, что указывает на корректность применения других констант взаимодействия.

Таблица 1. Параметры силового поля оригинального ClayFF и полученных модификаций. Погрешности в последнем знаке связаны с флуктуациями алгоритма DDEC6

Параметр	ClayFF	DDEC6	Бадер
q_{Li} , [e]	0.525	0.828	0.877
q_{Al} , [e]	1.575	1.775	2.933
q_{O} , [e]	-0.950	-1.035	-1.659
q_{H} , [e]	0.420	0.401	0.662
q_{Cl} , [e]	-1.00	-0.575	-0.756
k_1 (ккал/моль \AA^2)	554.1349		
k_2 (ккал/моль рад ²)	30.0	–	–

Плотность валентных электронов, необходимая для пересчета зарядов, рассчитывалась методом функционала электронной плотности в Quantum Espresso [33] на основе структуры, полученной нейтронной дифракцией для дегидратированного ДГАЛ-С1 [9].

Итоговые параметры силового поля приведены в табл. 1. В итоговом силовом поле также отсутствует угловое гармоническое взаимодействие М–О–Н. Как показала практика, его присутствие приводит к разрушению структуры при нагреве до 300 К (см. рис. 1, левая часть) и отсутствию межламельярного перехода ионов Li. Наибольшее изменение эффективных зарядов заметно для ионов Li и Cl, что ожидаемо, так как именно в наличии этих ионов заключается отличие ДГАЛ-С1 от стабильного гиббсита Al(OH)₃, на описание структурных свойств которого ClayFF и был изначально параметризован [19].

Расчет молекулярной динамики производился в пакете LAMMPS [34]. Итоговую моделируемую структуру можно увидеть на рис. 1, правая часть.

3. Процедура моделирования. Элементарная ячейка с экспериментально определенными положениями атомов была размножена в $7 \times 7 \times 2$ раз,

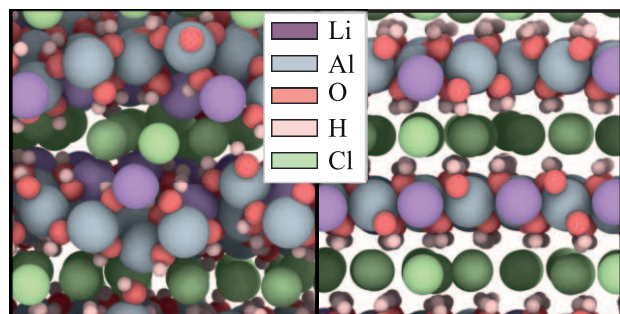


Рис. 1. (Цветной онлайн) Срез моделируемой структуры для оригинального ClayFF (слева) и нашей модификации (справа) при 300 К после 1 нс расчета

таким образом, вычислительная ячейка содержала 3136 атомов. Процесс нагрева от 0 до 300 К производился в анизотропном *NPT* ансамбле с использованием термостата и баростата Нозе–Гувера в течение 300 пс при единичном давлении. В дальнейшем запускались расчеты длиной в 5–20 нс в ансамбле, зависящем от исследуемой характеристики. Такой подход позволял достигать близкого к равновесному состояния вне зависимости от смены ансамбля (см. рис. 2). Расчет среднеквадратичного смещения (RMSD) производился по следующей стандартной формуле:

$$\text{RMSD}(t) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)\|^2}.$$

На рисунке 2 виден резкий скачок от нуля на самых первых шагах интегрирования. В дальнейшем система приходит в одно и то же среднее состояние вне зависимости от ансамбля – это свидетельствует о корректной процедуре выхода на равновесие.

Для анализа распределения плотности и радиальных функций распределения использовался ансамбль *NPT*, чтобы соответствовать реальным условиям. В то же время диффузия атомов лития в межламельном пространстве была изучена как в ансамбле *NPT*, так и в ансамбле *NVE*. Такой подход позволяет оценить влияние баростата на характеристики диффузии в системе. Средние параметры были вычислены на основе последних половин траекторий с целью не учитывать участок выхода на равновесие.

Для определения средних параметров элементарной ячейки был произведен анизотропный расчет в *NPT* со свободными углами.

4. Структурные свойства модели. Распределение плотности вероятности частиц вдоль *Oz* приведено на рис. 3. Из распределения видно, что самыми локализованными частицами в системе явля-

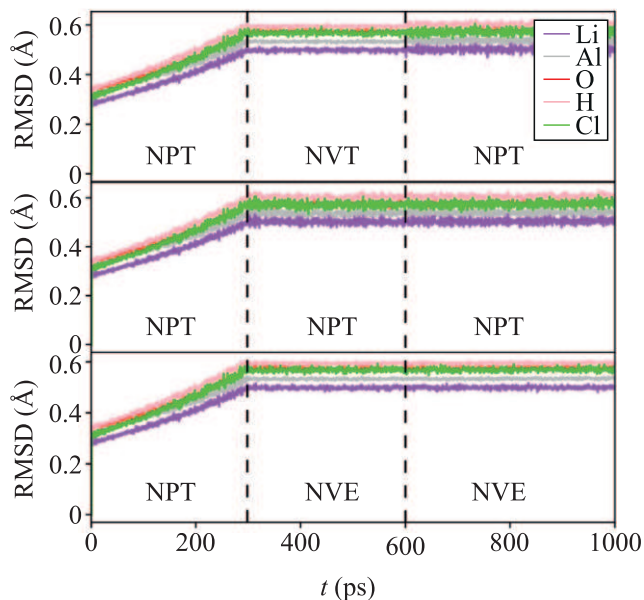


Рис. 2. Зависимость RMSD от времени для вычислений в различных комбинациях ансамблей

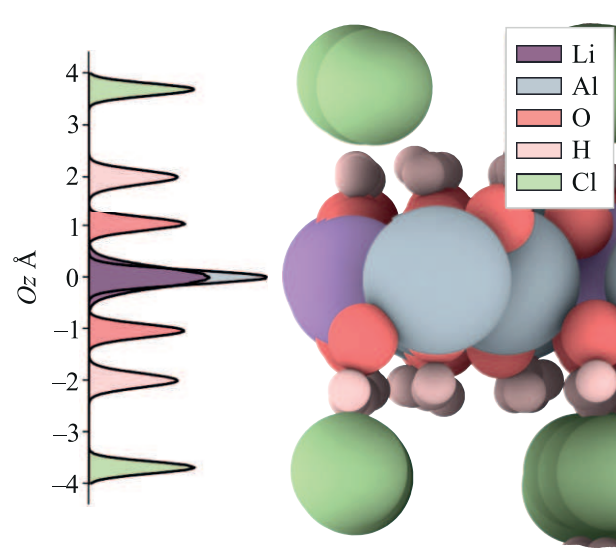


Рис. 3. (Цветной онлайн) Усредненное распределение плотности вероятности частиц вдоль *Oz* для одной ламели

ются ионы алюминия и лития, что говорит о стабильности ламели. Также заметно, что пик лития шире пика алюминия – это может объясняться меньшей энергией связи атома лития с кристаллической структурой. Примерно равный по высоте с литиевым пиком пик хлора свидетельствует об относительно сильной локализации атома хлора в положении равновесия, что согласуется с экспериментальными данными касательно анионов в межламельном пространстве [4, 9].

Сравнение парциальных радиальных функций распределения для трех пар атомов с экспериментальными данными приведено на рис. 4. Для наглядности совпадения формы экспериментальных и вы-

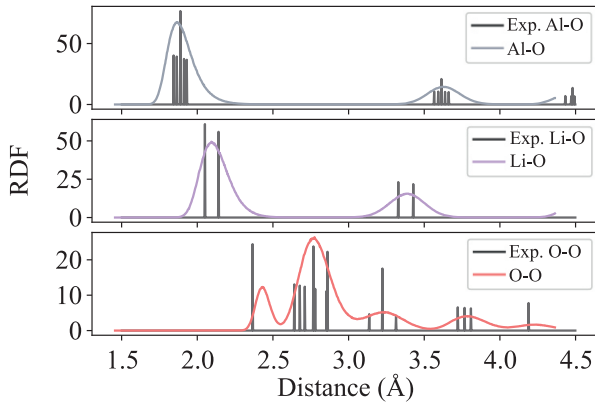


Рис. 4. (Цветной онлайн) Парциальные радиальные функции распределения. Для экспериментальных данных [9] разница высот определяется относительной частотой попадания атомов в координационную сферу

численных данных масштаб по Ox для RDF модели был домножен на характерное изменение длины, связанное с разностью плотностей модели и реальной структуры, равное 0.97. Качественно форма радиальной функции распределения совпадает с экспериментальными пиками, хотя в модели атомы в среднем отделились друг от друга. Этот результат ожидаем, так как равновесная элементарная ячейка получилась шире по Oz , чем экспериментальная, т.е. в полученной модели наблюдается излишнее отталкивание ламелей друг от друга. Более глубокое понимание отличий и сходств модели с экспериментальными данными дает анизотропный расчет со свободными углами вычислительной ячейки в NPT ансамбле (см. табл. 2).

Как видно из табл. 2, модель не сохраняет реальную плотность из-за слишком сильного отталкивания ламелей друг от друга. Тем не менее углы элементарной ячейки равны экспериментальным, величина погрешности в основном связана с малым количеством частиц в расчете и длиной траекторий.

5. Диффузионные свойства модели. В данном пункте один из атомов лития был помещен в несоседнее к родной ламели межламеллярное пространство. Такая процедура обусловлена важностью сохранения электронейтральности системы и обусловлена допущением, что удаление атома лития на расстояние в несколько ламелей (в данном случае примерно 15 Å) нивелирует влияние заряженной родной ламели.

Методы молекулярной динамики широко при-

Таблица 2. Сравнение параметров элементарной ячейки для полученной модели в анизотропном расчете со свободными углами с экспериментальными данными

Параметр	Эксперимент [9]	Эта работа
a (Å)	5.1	5.17 ± 0.01
b (Å)	5.1	5.17 ± 0.01
c (Å)	14.3	16.01 ± 0.01
α (°)	90	89.9 ± 0.3
β (°)	90	90.0 ± 0.3
γ (°)	120	120.0 ± 0.1
V (Å ³)	322.1	369 ± 2
ρ (г/см ³)	2.04	1.78 ± 0.01

меняются для расчета диффузии в твердых телах [35–39] и жидкостях [40–46]. Для расчета двумерной диффузии применяется формула Эйнштейна–Смолуховского:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle [\mathbf{r}_{i,a}(t) - \mathbf{r}_{i,a}(0)]^2 \rangle = 2dD_a t,$$

где i, a – индекс и тип частицы, d – размерность пространства движения, D_a – коэффициент диффузии, t – время.

На рисунке 5 изображена кривая, демонстрирующая зависимость коэффициента диффузии от температуры. Видно, что наблюдается согласованность динамических характеристик с результатами, полученными методом квантовой молекулярной динамики в работе [11]. Начиная с температуры 350 К (температура синтеза ДГАЛ-Cl [24]), для атомов лития проявляется межламеллярная подвижность за счет выбивания другого атома лития из ламели. При температуре 500 К было затруднительно получить достаточное количество данных о диффузии из-за быстрой рекомбинации искусственной вакансии, связанной с ограниченным размером моделируемой системы. При экстраполяции же данных до температуры 500 К выявляется различие, вероятно, обусловленное недооценкой плотности в нашей модели. Расчет диффузии при больших температурах был затруднен, так как начиная с 350 К (это температура синтеза ДГАЛ-Cl [24]), исходный атом быстро встраивается в ближайший слой, выбивая оттуда другой атом лития.

Также из левой вставки на рис. 5 можно качественно оценить влияние NPT ансамбля на диффузионный процесс: коэффициент диффузии не поменялся, но возник участок, отвечающий “замедлению” атома лития – связанное со случайными флуктуациями расхождение, которое должно исчезать при увеличении выборки усредняемых траекторий. Это указывает на статистическую незначимость влияния баростата и термостата на систему и то, что даль-

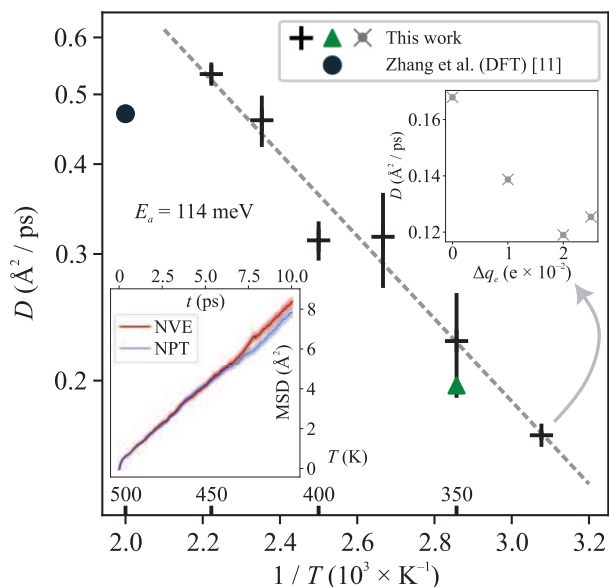


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициента диффузии атома лития в межламельлярном слое от обратной температуры в логарифмическом масштабе и линейная регрессия. Треугольным маркером обозначен расчет при большем числе частиц. На вставке слева среднее квадратичное отклонение атома лития в межламельлярном слое для ансамблей *NVE* и *NPT* при $T = 300$ К. Полупрозрачное обрамление линий отвечает среднему квадратичному отклонению при подсчете MSD. На вставке справа зависимость коэффициента диффузии от изменения зарядов пары *Li–Cl*

нейшие расчеты диффузии в уже гидратированном ДГАЛ-С1 можно производить в *NPT* ансамбле с поправкой на этот эффект.

С целью проверки устойчивости результатов статьи к малым вариациям зарядов были проведены расчеты коэффициента диффузии лития при 325 К при измененных эффективных зарядах в паре *Li–Cl* (см. правую вставку рис. 5). Для поддержания электронейтральности системы заряды q_{Li} и q_{Cl} соответственно увеличивались и уменьшались на Δq_e в пределах 5 % от их оригинального значения. В результате коэффициент диффузии постепенно уменьшался до 75 % от своей изначальной величины, что говорит об относительно сильном влиянии точных значений эффективных зарядов на свойства системы.

Также при 350 К был проведен расчет с большим числом частиц (7776 атомов) с целью оценки влияния числа частиц на измеряемые характеристики. Как видно из рис. 5, полученные коэффициенты диффузии находятся в пределах погрешности, что говорит о достаточном размере системы.

Энергию активации можно оценить из темпе-

ратурной зависимости коэффициента диффузии (рис. 5) по формуле

$$D = D_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{k_B T}}.$$

Получившиеся значение энергии активации оказалось равным 114 ± 8 мэВ, что соотносится с величиной потенциального барьера в межламельлярном пространстве в 177 мэВ, полученном методом функционала электронной плотности [11].

6. Заключение. В настоящей работе построена стабильная модель дегидратированного двойного слоистого гидроксида алюминия и лития (ДГАЛ-С1). Вычислены структурные и диффузионные свойства ДГАЛ-С1 в рамках данной модели.

1. Репараметризованы эффективные заряды и убрано угловое взаимодействие *M–O–N* из потенциала ClayFF. Изменение заряда зависит от атома к атому: от 5 % для водорода до 60 % для лития. Такой подход позволяет воспроизвести стабильную во времени структуру ДГАЛ-С1.

2. Распределение плотности вероятности частиц вдоль *Oz* и радиальные функции распределения атомов в ламелях для пар *Al–O*, *Li–O* и *O–O* свидетельствуют о воспроизведении экспериментальной структуры ближнего порядка. Найдены положения максимумов и относительные высоты от первой до второй координационной сферы для пары *Li–O*, до третьей для *Al–O*, до пятой для *O–O*. Данные согласуются с экспериментом.

3. Вычислена температурная зависимость коэффициента диффузии межламельлярного лития в диапазоне 325–450 К, найдена энергия активации в 114 мэВ. Результаты согласуются с величиной потенциального барьера лития в межламельлярном пространстве, рассчитанной методом функционала электронной плотности [11].

4. Результаты позволяют сделать вывод о базовой возможности анализа свойств ДГАЛ-С1 при помощи молекулярной динамики на основе простых силовых полей. При этом сохраняются как структурные, так и диффузионные свойства материала. Это свидетельствует о применимости предложенного метода репараметризации зарядов для изучения потенциальных путей модификации структуры ДГАЛ-С1.

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства “Приоритет-2030” (соглашение 075-02-2021-1316 от 30.09.2021) – В. Г. Лукьянчук и А. В. Ланкин, и при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание # 075-01129-23-00) – Г. Э. Норман.

Авторские расчеты в работе выполнены на кластере Лаборатории многомасштабного моделирования в физике мягкой материи МФТИ *Soft cluster*.

1. H. Bae and Y. Kim, *Mater. Adv.* **2**, 3234 (2021).
2. Y. Liu, B. Ma, Y. Lü, C. Wang, and Y. Chen, *Int. J. Miner. Metall. Mater.* **30**, 209 (2023).
3. A. Khalil, S. Mohammed, R. Hashaikheh, and N. Hilal, *Desalination* **528**, 115611 (2022).
4. M. Lal and A. T. Howe, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **15**, 737 (1980).
5. M. P. Paranthaman, L. Li, J. Luo, T. Hoke, H. Ucar, B. A. Moyer, and S. Harrison, *Environ. Sci. Technol.* **51**, 13481 (2017).
6. А. Б. Алхасов, Д. А. Алхасова, А. Ш. Рамазанов, М. А. Каспарова, *Теплоэнергетика* **6**, 25 (2016).
7. А. Б. Алхасов, Д. А. Алхасова, А. Ш. Рамазанов, М. А. Каспарова, *Теплоэнергетика* **7**, 17 (2017).
8. L. Wu, L. Li, S. F. Evans, T. A. Eskander, B. A. Moyer, Z. Hu, P. J. Antonick, S. Harrison, M. P. Paranthaman, R. Riman, and A. Navrotsky, *J. Am. Ceram. Soc.* **102**, 2398 (2019).
9. A. V. Besserguenev, T. D. Dzhambazov, O. V. Magdysyuk, and P. G. Bruce, *Chem. Mater.* **9**, 241 (1997).
10. D. G. Costa, A. B. Rocha, R. Diniz, W. F. Souza, S. S. X. Chiaro, and A. A. Leitao, *J. Phys. Chem. C* **114**, 14133 (2010).
11. Y. Zhang, X. Cheng, C. Wu, J. Köhler, and S. Deng, *Molecules* **24**, 2667 (2019).
12. Н. Д. Кондратюк, В. В. Писарев, *УФН* **193**, 437 (2023).
13. Н. М. Щелкачев, Р. Е. Рыльцев, *Письма в ЖЭТФ* **102**, 732 (2015).
14. В. Р. Белослудов, К. В. Гец, Р. К. Жданов, Ю. Ю. Божко, Р. В. Белослудов, Л.-Дж. Чен, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 144 (2022).
15. Е. О. Хазиева, Н. М. Щелкачев, А. О. Типеев, Р. Е. Рыльцев, *ЖЭТФ* **164** (2023), принята в печать.
16. J. Chen and L. Li, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 119 (2020).
17. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, *УФН* **190**(5), 449 (2020).
18. R. T. Cygan, J. J. Liang, and A. G. Kalinichev, *J. Phys. Chem. B* **108**, 1255 (2004).
19. R. T. Cygan, J. A. Greathouse, and A. G. Kalinichev, *J. Phys. Chem. C* **125**, 17573 (2021).
20. N. Kim, A. Harale, T. T. Tsotsis, and M. Sahimi, *J. Chem. Phys.* **127**, 224701 (2007).
21. G. M. Lombardo, G. C. Pappalardo, F. Punzo, F. Costantino, U. Costantino, and M. Sisani, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2005**, 5026 (2005).
22. A. C. T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, and W. A. Goddard III, *J. Phys. Chem. A* **105**, 9396 (2001).
23. T. P. Senftle, S. Hong, M. M. Islam, S. B. Kylasa, Y. Zheng, Y. K. Shin, C. Junkermeier, R. Engel-Herbert, M. J. Janik, H. M. Aktulga, T. Verstraelen, A. Grama, and A. C. T. van Duin, *npj Comput Mater* **2**, 15011 (2016).
24. I. Sissoko, E. T. Iyagba, R. Sahai, and P. Biloen, *J. Solid State Chem.* **60**, 283 (1985).
25. S.-T. Zhang, H. Yan, M. Wei, D. G. Evans, and X. Duan, *J. Phys. Chem. C* **116**, 3421 (2012).
26. E. V. Tararushkin, V. V. Pisarev, and A. G. Kalinichev, *Cement and Concrete Research* **156**, 106759 (2022).
27. G. Pérez-Sánchez, T. L. P. Galvao, J. Tedim, and J. R. B. Gomes, *Appl. Clay Sci.* **165**, 164 (2018).
28. T. A. Manz and N. G. Limas, *RSC Adv.* **6**, 47771 (2016).
29. N. G. Limas and T. A. Manz, *RSC Adv.* **6**, 45727 (2016).
30. B. Delley, *J. Chem. Phys.* **113**, 7756 (2000).
31. W. Tang, E. Sanville, and G. Henkelman, *J. Phys. Condens. Matter* **21**, 084204 (2009).
32. M. Pekka and N. Lennart, *J. Phys. Chem. A* **105**, 9954 (2001).
33. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al. (Collaboration), *J. Phys. Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
34. A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger et al. (Collaboration), *Comput. Phys. Commun.* **271**, 10817 (2022).
35. Е. А. Лобашев, А. С. Антропов, В. В. Стегайлов, *ЖЭТФ* **163**, 201 (2023).
36. A. Antropov and V. Stegailov, *J. Nucl. Mater.* **573**, 154123 (2023).
37. A. B. Belonoshko, J. Fu, and G. Smirnov, *Phys. Rev. B* **104**, 104103 (2021).
38. A. B. Belonoshko, S. I. Simak, W. Olovsson, and O. Yu. Vekilova, *Phys. Rev. B* **105**, L180102 (2022).
39. V. G. Baidakov and A. O. Tipeev, *J. Non-Cryst. Solids* **503-504**, 302 (2019).
40. N. D. Kondratyuk, G. E. Norman, and V. V. Stegailov, *J. Chem. Phys.* **145**, 204504 (2016).
41. N. Kondratyuk, D. Lenev, and V. Pisarev, *J. Chem. Phys.* **152**, 191104 (2020).
42. J. T. Bullerjahn, S. von Bülow, and G. Hummer, *J. Chem. Phys.* **153**, 024116 (2020).
43. D. M. Heyes, E. R. Smith, and D. Dini, *J. Chem. Phys.* **150**, 174504 (2019).
44. A. O. Tipeev, E. D. Zanotto, and J. P. Rino, *J. Phys. Chem. C* **122**, 28884 (2018).
45. V. I. Deshchenya, N. D. Kondratyuk, A. V. Lankin, and G. E. Norman, *J. Mol. Liq.* **367**, 120456 (2022).
46. О. В. Кашурин, Н. Д. Кондратюк, А. В. Ланкин, Г. Э. Норман, *Журнал физической химии* **97**, 836 (2023).